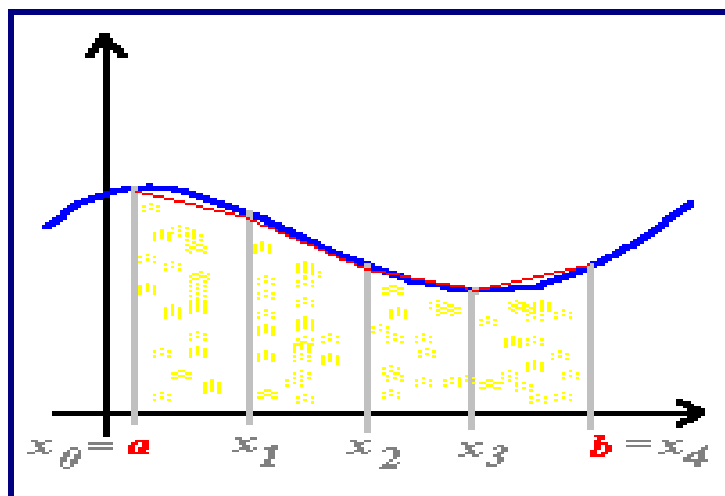


CECÍLIO SEMEDO CABRAL



APROXIMAÇÕES NUMÉRICAS E APLICAÇÕES COM MAPLE 7 DE: INTERPOLAÇÃO POLINOMIAL E INTEGRAÇÃO NUMÉRICA

Licenciatura em Ensino de Matemática

UNICV/2009



UNIVERSIDADE DE CABO VERDE

DEPARTAMENTO DE CIÊNCIA & TECNOLOGIA

CECÍLIO SEMEDO CABRAL

TEMA:

**APROXIMAÇÕES NUMÉRICAS E APLICAÇÕES COM MAPLE 7 DE:
INTERPOLAÇÃO POLINOMIAL E INTEGRAÇÃO NUMÉRICA**

Trabalho científico apresentado ao UNICV para obtenção de grau de Licenciatura
em Ensino de Matemática

Orientador:

Eng.º Aurélio Vicente

UNICV/2009

O júri:

/Presidente/

/Arguente/

/Orientador/

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho a meus pais, Frederico e Margarida, pelo esforço, dedicação e compreensão, em todos os momentos desta e de outras caminhadas.

AGRADECIMENTOS

Quero registrar aqui o meu público agradecimento a todos que, de uma forma ou de outra, contribuíram para a realização deste trabalho, destacando-se alguns deles:

Primeiramente a Deus pela saúde, fé e perseverança que tem me dado; a Ana, minha fiel amiga e companheira na hora da tribulação; a meus pais, a quem honro pelo esforço com o qual mantiveram 4 filhos na escola pública; os meus amigos pelo incentivo a busca de novos conhecimentos; a todos os professores que muito contribuíram para a minha formação; a professora Dr.^a Astrigilda pela bibliografia disponibilizada e finalmente um agradecimento especial ao meu orientador Eng.^o Aurélio Vicente pela sabedoria e dedicação demonstrado durante a realização deste trabalho.

ÍNDICE

INTRODUÇÃO.....	10
Enquadramento	10
Relevância do tema.....	12
Objectivos	12
Metodologia	13
Estrutura do trabalho.....	13
 CAPITULO I_ INTERPOLAÇÃO POLINOMIAL.....	14
1.1. Introdução	14
1.2. Interpolação Polinomial de Lagrange	16
1.2.1. Polinómio Interpolador: Existência e Unicidade	16
1.2.2. Fórmula de Lagrange.....	18
1.2.3. Diferenças Divididas.....	21
1.2.4. Fórmula de Newton	23
1.2.5. Interpolação Inversa	25
1.2.6. Erros de Interpolação.....	27
1.3. Interpolação de Hermite.....	29
1.4. Interpolação com funções Spline (Interpolação segmentada)	34
1.4.1. Spline Interpolador de grau zero.....	35
1.4.2. Spline Interpolador Linear (ou Spline de grau um).....	36
1.4.3. Spline Interpolador Quadrático.....	37
1.4.4. Spline Interpolador Cúbico	41

CAPITULO II_ INTEGRAÇÃO NUMÉRICA	51
2.1. Introdução	51
2.2. Regras Básicas	53
2.2.1. Regras de Rectângulo.....	54
2.2.2. Regra do Ponto Médio.....	55
2.2.3. Regra do Trapézio.....	56
2.2.4. Regra de Simpson	57
2.2.5. Regras de Newton-Cotes	58
2.2.6. Erros de Integração.....	59
2.3. Regras de Gauss.....	62
2.3.1. Dedução das Fórmulas	62
2.3.2. Erros de Integração.....	65
2.4. Regras Compostas	66
2.4.1. Regra do Rectângulo à Esquerda Composta	67
2.4.2. Regra do Rectângulo à Direita Composta.....	67
2.4.3. Regra do Ponto Médio Composta.....	68
2.4.4. Regra do Trapézio Composta	68
2.4.5. Regra de Simpson Composta.....	70
2.4.6. Regra do Trapézio Corrigida Composta.....	71
 CONCLUSÃO	 74
BIBLIOGRAFIA.....	76
ANEXOS	78

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 1 – Diferenças Divididas.....	21
Tabela 2 – Polinómio Cúbico de Hermite através de Diferenças Divididas	31
Tabela 3 – Fórmulas de Newton-Cotes	58
Tabela 4 – Fórmulas de Gauss ou Gauss-Legendre com $(n+1)$ pontos	65

ÍNDICE DE FIGURAS

Fig. 1- Interpolação Linear.....	27
Fig. 2- Regra de Trapézio.....	52
Fig. 3- Regra do Rectângulo à Esquerda.....	54
Fig. 4- Regra do Rectângulo à Direita	55
Fig. 5- Regra do Rectângulo	55
Fig. 6- Regra do Ponto Médio	55
Fig. 7- Regra do Trapézio	56
Fig. 8- Regra de Simpson.....	57
Fig. 9- Regra do Trapézio Composta.....	68
Fig. 10- Regra de Simpson Composta	70

INTRODUÇÃO

Enquadramento

A Matemática é usada na maioria das aplicações da Ciência e da Tecnologia. Tem sempre havido uma relação muito próxima entre elas. Algumas das áreas da Matemática surgiram e foram desenvolvidas na tentativa, às vezes até frustrada, de solucionar problemas reais, ou seja, aqueles relacionados com alguma situação prática (CLÁUDIO, 1991).

Com frequência estes problemas reais não podem ser convenientemente solucionados através de fórmulas exactas. Assim se for possível aceitar uma solução aproximada, os métodos numéricos serão as ferramentas adequadas para sua solução.

Uma grande fonte dos métodos numéricos é as soluções e demonstrações matemáticas que geram métodos construtivos ou algorítmicos. Os algoritmos gerados são utilizados para se obter as soluções numéricas.

As aplicações em cálculo numérico são largamente utilizadas em diversos processos da Engenharia. Sua utilização vai desde a determinação de raízes de equações, passando por interpolação de valores tabelados, equações diferenciais parciais ou ordinárias até integração numérica entre outros. Desta forma, torna-se cada vez mais comum a necessidade de programar tais aplicações para a resolução de problemas do quotidiano do profissional da área de Engenharia.

São inúmeros os problemas de Engenharia que se resolvem através de integrais. Apesar de existirem tabelas de primitivas para uma grande classe de funções, o que de certo é que, na maior parte dos casos seja necessário usar integração numérica. Algumas vezes, porque a

função a integrar é muito complicada outras, simplesmente não podem ser primitivadas usando funções elementares ou então porque não se conhece a expressão analítica da função.

Os métodos numéricos aproximam o valor de um integral definido de uma dada função através de uma soma ponderada de valores da função em pontos específicos.

A interpolação permite fazer a reconstituição (aproximada) de uma função, apenas conhecendo algumas das suas abcissas e respectivas ordenadas (imagens). É um método que permite construir um novo conjunto de dados a partir de um conjunto discreto de dados pontuais.

Em Engenharia e Ciência, geralmente tem-se dados pontuais a partir de uma amostragem ou experimento. Através da interpolação pode-se construir uma função que aproximadamente encaixe nestes dados pontuais.

Outra aplicação da interpolação é a aproximação de funções complexas por funções mais simples. Suponha que tenhamos uma função, mas que seja muito complicada para avaliar de forma eficiente. Podemos então, escolher alguns dados pontuais da função complicada e tentar interpolá-la estes dados para construir uma função mais simples.

Obviamente, quando utilizamos a função mais simples para calcular novos dados, não se obtém o mesmo resultado da função original, mas dependendo do domínio do problema e do método de interpolação utilizado, o ganho de simplicidade pode compensar o erro.

Existem vários problemas matemáticos cujas soluções não são possíveis determinar por métodos analíticos. Por exemplo: o cálculo do valor de um integral de uma função cuja primitiva não se conhece; a determinação de zeros de uma função; e, em particular, de um polinómio quando não existe uma fórmula explícita para o fazer.

Quando situações, como as exemplificadas, acontecem são muitas vezes possíveis recorrer a determinados métodos (Métodos Numéricos) para obter uma solução aproximada para o problema em questão.

Alguns destes métodos associados a estes problemas comuns são: cálculo de raízes de equações não lineares, resolução de sistemas de equações lineares, interpolação polinomial e cálculo integral ou integração numérica.

Neste presente trabalho encontram-se os principais métodos numéricos para a obtenção da interpolação polinomial e determinação aproximada de uma integração numérica.

Basicamente, o método numérico é um conjunto ordenado de operações aritméticas e lógicas fundamentadas em teoremas da Análise Matemática, que conduz à solução aproximada do problema.

É de salientar que o aparecimento de computadores veio possibilitar cálculos numéricos que até então pareciam impossíveis, o que teve como reflexo o desenvolvimento de novos métodos

numéricos e o aperfeiçoamento dos já existentes. Desde então, a Análise Numérica desenvolveu-se como ciência própria contribuindo para a resolução dos mais variados problemas numéricos. A Análise Numérica desenvolveu uma teoria própria denominada a *Teoria dos Erros*. Deste modo, um método numérico deve ser sempre acompanhado de um estudo sobre majorações de erros e convergência.

Relevância do tema

É de constatar que a Análise Numérica e Computacional é uma das áreas da Matemática que muito tem contribuído para o desenvolvimento da Computação, da Engenharia. É um ramo da Matemática que desenvolve métodos para a aproximação da solução de problemas complexos, que não são resolúveis por técnicas analíticas. Atendendo a estes e outros factos a escolha do tema “Aproximações Numéricas de Interpolação Polinomial e Integração Numérica com Aplicação do Maple 7” recai no facto de analisar os principais métodos de interpolação e de integração numérica e também impulsionar a utilização de novas tecnologias em particular o software Maple 7.

Objectivos

Este trabalho tem como objectivo estudar os diferentes métodos utilizados para obter polinómio interpolador e apresentar as principais regras de integração numérica.

Com o mesmo pretende-se desenvolver conhecimentos que permitem:

- Compreender os métodos de interpolação;
- Identificar as vantagens e desvantagens de cada um dos métodos;
- Utilizar as ferramentas computacionais (como por exemplo Maple 7) na obtenção do polinómio de interpolação;
- Analisar o erro de interpolação;
- Compreender as regras de integração numérica, identificando as vantagens e desvantagens de cada uma;
- Analisar o erro de integração numérica;
- Criar rotinas no Maple 7, que permitem, numericamente determinar uma aproximação para a integração numérica.

Metodologia

Quanto à metodologia utilizada, foi do tipo: pesquisa bibliográfica e exploratória. Inicialmente foi feita uma longa e exaustiva pesquisa dos dados bibliográficos existentes e na Internet de modo a definir as linhas orientadoras do trabalho. Após análise bibliográfica, centrou-se ao desenvolvimento do tema em estudo. Na parte final do trabalho efectuou-se um estudo do software Maple 7 e sua aplicação no tema em estudo.

Estrutura do trabalho

Esta monografia divide-se em 2 capítulos. No primeiro realizou-se um estudo sobre a interpolação polinomial, assim como, a descrição de alguns métodos de interpolação na determinação do polinómio interpolador, entre os quais, o método de Lagrange e o método de Newton, foi feita a análise do erro de interpolação, uma vez que interpolar um polinómio é aproximá-lo de uma função e a obtida não será a mesma que a original, e neste mesmo capítulo, fez-se a aplicação do software, Maple 7 para determinação do polinómio interpolador. No segundo capítulo foi introduzida a noção da integração numérica, assim como, as regras de integração numérica, análise dos erros de integração e a aplicação do software, Maple 7.

CAPÍTULO I – INTERPOLAÇÃO POLINOMIAL

1.1. Introdução

Este capítulo e o seguinte são dedicados a aproximação de funções, isto é, dada uma função f obter uma função g , em geral mais simples, que aproxima f , segundo um certo critério.

A interpolação polinomial consiste em escolher dentro de uma classe de funções a função g (interpoladora) cujo gráfico, definido por $y = g(x)$, passa por um dado conjunto de pontos (x_i, y_i) , $i = 0, 1, \dots, n$. O critério de aproximação consiste, portanto, em impor

$$g(x_i) = f(x_i), \quad i = 0, 1, \dots, n \quad (1)$$

Devido às suas propriedades algébricas e analíticas, os polinómios são as funções mais frequentemente utilizadas na aproximação e em particular na interpolação. A interpolação polinomial é utilizada preferencialmente na resolução de equações não lineares, diferenciais e integrais, na derivação e integração numérica e na interpolação de tabelas; constituindo a base de muitos métodos numéricos.

Dado que a interpolação polinomial fornece, frequentemente uma aproximação grosseira da função, tem vindo a ser substituída pela interpolação por Spline e pela interpolação racional. O interesse pela interpolação por Spline tem vindo a crescer nos últimos anos. É utilizada, por exemplo, no traçado de gráficos, na derivação e, tal como a interpolação racional, no cálculo computacional de funções.

Como já referimos, a interpolação tem várias aplicações importantes. A mais antiga consiste em interpolar uma tabela, isto é, definida uma função $f(x)$ por meio de uma tabela, obter um

valor aproximado de $f(x)$ correspondente a um argumento x não tabelado ($x \neq x_i, i = 0, 1, \dots, n$).

Hoje em dia a utilização de tabelas caiu um pouco em desuso visto que podemos, quase sempre, determinar directamente o valor de uma função com o auxílio do computador.

Neste capítulo, são deduzidas as fórmulas de Lagrange e de Newton. Porque a interpolação é uma aproximação, dá-se especial relevo ao erro cometido. Assim, faz-se referência ao exemplo de Runge e apresenta-se a interpolação utilizando para nós os zeros de polinómios de Chebyshev o que permite obter aproximação que quase minimiza o erro no sentido da norma do máximo.

Teorema 1.1. (Weierstrass): Seja $\bar{\Omega}$ um intervalo finito, e ε , um número real positivo arbitrário. Então, para qualquer função $f \in C(\bar{\Omega})$, existe um polinómio p tal que $\|f - p\|_{\infty} < \varepsilon$. (Pina, 1995, p. 37)

Podemos concluir, que numa vizinhança de qualquer função contínua existe sempre um polinómio. Por outro lado, um polinómio pode ser calculado recorrendo apenas a operações aritméticas em número finito e, portanto, é a única função que pode ser calculada pelo computador sem recorrer a aproximações envolvendo precisamente polinómios.

Tendo em atenção as vantagens destas propriedades (outras poderiam ser apresentadas), pode afirmar-se que são os polinómios excelentes candidatos para desempenharem o papel da função f .

A ideia de interpolar valores de uma função pode estender-se também à própria interpolação de valores das derivadas, pelo que o problema geral da interpolação se pode formular da seguinte maneira:

- Determinar a função f que satisfaz as condições

$$f^{(j)}(x_i) = y_{ij}, \quad j = 0, 1, \dots, m_i, \quad i = 0, 1, \dots, n \quad (2)$$

em que m_i é o número de derivadas a interpolar no nó x_i , e os y_{ij} são os valores a interpolar e são considerados como dados.

Quando os m_i forem todos iguais a zero diz-se que a interpolação polinomial é do tipo de Lagrange (só se interpola a função).

Se os m_i não forem todos iguais a zero diz-se que a interpolação polinomial é do tipo de Hermite e do tipo de Birkhoff (interpola-se não só a função como também a(s) sua(s) derivada(s)).

Definição 1.1. Diz-se que uma função é um polinómio de grau n se puder ser escrito na forma

$$p_n(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_1 x + a_0 \quad (3)$$

em que n é um número natural e $a_n \neq 0$ excepto se $n=0$. Aos a_0, a_1, \dots, a_n , dá-se o nome de coeficientes do polinómio, e a n , o de grau do polinómio p , denotado por $\deg p$. O conjunto de polinómios de grau menor ou igual a n será designado por P_n . Se $a_n = 1$, o polinómio designa-se mónico. (Pina, 1995, p. 37)

Algumas formas de se encontrar o polinómio interpolador P_n são através dos polinómios de Lagrange e fórmula de Newton.

1.2. Interpolação Polinomial de Lagrange

1.2.1. Polinómio Interpolador: Existência e Unicidade

Consideremos um conjunto de pontos (designados nós de interpolação) x_0, x_1, \dots, x_n , a que estão associados os valores de uma função: f_0, f_1, \dots, f_n , respectivamente. Pretendemos encontrar um polinómio $p(x)$, tal que

$$p(x_i) = f_i, \text{ para } i = 0, 1, \dots, n.$$

Escrevendo $p_n(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_n x^n$, obtemos o sistema

$$\begin{cases} a_0 + a_1 x_0 + a_2 x_0^2 + \dots + a_n x_0^n = f(x_0) \\ a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_1^2 + \dots + a_n x_1^n = f(x_1) \\ \dots \\ a_0 + a_1 x_n + a_2 x_n^2 + \dots + a_n x_n^n = f(x_n) \end{cases} \quad (4)$$

Obtemos assim o sistema linear:

$$\begin{bmatrix} 1 & x_0 & \dots & x_0^n \\ 1 & x_1 & \dots & x_1^n \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_n & \dots & x_n^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \dots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ \dots \\ f(x_n) \end{bmatrix}$$

em que a matriz do sistema é conhecida como Matriz de Vandermonde.

A solução do sistema fornece os coeficientes do polinómio.

Embora os coeficientes, a_i , possam ser determinados pela solução de equações simultâneas usando um programa de computador, tal tentativa não é desejável por duas razões. Primeira, seria necessário um programa para resolver um conjunto de equações lineares, e, segunda, a solução por computador pode não ser exacta.

Felizmente, existem muitos métodos para determinar a Interpolação Polinomial sem resolver o sistema de equações lineares. Métodos esses que estudaremos mais a frente.

A existência e unicidade do polinómio interpolador é equivalente a assegurar que o sistema é possível e determinado para quaisquer x_0, x_1, \dots, x_n distintos.

O teorema seguinte mostra-nos que o polinómio interpolador existe e é único.

Teorema 1.2. Seja P_n o conjunto dos polinómios de grau menor ou igual a n . Dados $n+1$ pontos suporte distintos (x_i, y_i) , $i = 0, 1, \dots, n$, existe um e um só polinómio $p_n \in P_n$ tal que

$$p_n(x_i) = y_i, \quad i = 0, 1, \dots, n$$

Demonstração: A exigência de que o polinómio p_n , de grau menor ou igual a n , interpole os valores nodais y_i nos nós distintos x_i , $i = 0, 1, \dots, n$, obriga a que os coeficientes deste polinómio satisfaçam o sistema de equações lineares de ordem $n+1$

$$\sum_{k=0}^n a_k (x_i)^k = y_i, \quad i = 0, 1, \dots, n. \quad (5)$$

Para que este sistema tenha solução única é necessário e suficiente que a respectiva matriz dos coeficientes, conhecida por matriz de Vandermonde e definida por

$$V(x_0, x_1, \dots, x_n) = \begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \dots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^n \\ \dots & & & & \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^n \end{bmatrix} \quad (6)$$

possua um determinante diferente de zero.

O determinante de Vandermonde tem o valor

$$\det V(x_0, x_1, \dots, x_n) = \prod_{\substack{i, j=0 \\ j > i}}^n (x_j - x_i), \quad (7)$$

como se pode demonstrar por indução em n .

$$\text{Para } n=1, \text{ tem-se } V(x_0, x_1) = \begin{bmatrix} 1 & x_0 \\ 1 & x_1 \end{bmatrix}$$

verifica-se (7), pois $\det V(x_0, x_1) = x_1 - x_0$.

Suponhamos que ele é verdadeiro para $n-1$. Então, multiplicando a primeira coluna por x_0 e subtraindo o resultado à segunda coluna, multiplicando a segunda coluna por x_0 e subtraindo o resultado à terceira, etc., chegamos à igualdade

$$\det V(x_0, x_1, \dots, x_n) = \det \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & x_1 - x_0 & x_1(x_1 - x_0) & \dots & x_1^{n-1}(x_1 - x_0) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_n - x_0 & x_n(x_n - x_0) & \dots & x_n^{n-1}(x_n - x_0) \end{bmatrix}$$

Desenvolvendo este determinante, temos que

$$\det V(x_0, x_1, \dots, x_n) = (x_1 - x_0)(x_2 - x_0) \dots (x_n - x_0) \det \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^{n-1} \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \dots & x_2^{n-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^{n-1} \end{bmatrix}$$

e, portanto,

$$\begin{aligned} \det V(x_0, x_1, \dots, x_n) &= (x_1 - x_0)(x_2 - x_0) \dots (x_n - x_0) \det V(x_0, x_1, \dots, x_n) \\ &= \prod_{j=1}^n (x_j - x_0) \det V(x_0, x_1, \dots, x_n) \end{aligned}$$

Aplicando agora a $\det V(x_0, x_1, \dots, x_n)$ esta mesma expressão e procedendo assim sucessivamente de modo recursivo, obtém-se $\det V(x_0, x_1, \dots, x_n) = \prod_{\substack{i,j=0 \\ j>i}}^n (x_j - x_i)$.

Atendendo a que $x_i \neq x_j$ para $i \neq j$, o determinante da matriz de Vandermonde é não nulo e pode concluir-se imediatamente que o sistema tem solução única.

1.2.2. Fórmula de Lagrange

Uma via directa (não única) para construir o polinómio interpolador baseia-se nos polinómios de Lagrange.

Definição 1.2. Os polinómios de grau n

$$L_k(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^n \frac{x - x_i}{x_k - x_i}, \quad k = 0, 1, \dots, n \quad (8)$$

São designados por polinómios de Lagrange associados aos nós x_0, x_1, \dots, x_n .

Vamos ver que, recorrendo aos polinómios de Lagrange, a construção do polinómio interpolador é uma tarefa trivial.

Teorema 1.3. O polinómio interpolador p_n de grau menor ou igual a n que interpola os valores nodais y_0, y_1, \dots, y_n nos nós distintos x_0, x_1, \dots, x_n é dado por

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^n L_k(x) y_k. \quad (9)$$

Demonstração: Pela sua definição os polinómios L_k satisfazem a relação

$$L_k(x_j) = \delta_{kj}, \quad (10)$$

em que δ_{kj} é o delta de Kronecker e tem o seguinte significado

$$\delta_{kj} = \begin{cases} 1 & \text{se } k = j \\ 0 & \text{se } k \neq j \end{cases}.$$

Nestas condições

$$p_n(x_j) = \sum_{k=0}^n L_k(x_j) y_k = \sum_{k=0}^n \delta_{kj} y_k = y_j, \quad j = 0, 1, \dots, n.$$

Este polinómio p_n , cujo grau é menor ou igual a n , interpola os valores dados e é, pelo Teorema 1.2., o único polinómio interpolador nestes pontos.

Exemplo 1: Construir o polinómio interpolador de grau ≤ 2 que interpola os seguintes valores:

x_i	1	-1	2
y_i	0	-3	4

RESOLUÇÃO

Os polinómios de Lagrange associados aos nós ($x_0 = 1; x_1 = -1; x_2 = 2$).

$$L_k(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^2 \frac{x - x_i}{x_k - x_i}, \quad k = 0, 1, 2$$

$$L_0(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} = \frac{(x + 1)(x - 2)}{(1 + 1)(1 - 2)} = \frac{x^2 - x - 2}{-2}$$

$$L_1(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} = \frac{(x - 1)(x - 2)}{(-1 - 1)(-1 - 2)} = \frac{x^2 - 3x + 2}{6}$$

$$L_2(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} = \frac{(x - 1)(x + 1)}{(2 - 1)(2 + 1)} = \frac{x^2 - 1}{3}$$

Assim sendo, pelo Teorema 1.3., tem-se:

$$\begin{aligned}
p_2(x) &= \sum_{k=0}^2 L_k(x) y_k = L_0(x) y_0 + L_1(x) y_1 + L_2(x) y_2 \\
&= 0 \times \frac{x^2 - x - 2}{-2} - 3 \times \frac{x^2 - 3x + 2}{6} + 4 \times \frac{x^2 - 1}{3} = 0 - \frac{3x^2 - 9x - 6}{6} + \frac{4x^2 - 4}{3} \\
&= \frac{-3x^2 + 9x - 6}{6} + \frac{8x^2 - 8}{6} = \frac{5x^2 + 9x - 14}{6}
\end{aligned}$$

O polinómio interpolador é:

$$p_2(x) = \frac{5}{6}x^2 + \frac{3}{2}x - \frac{7}{3}$$

No Maple7 pode-se implementar uma rotina que permite determinar esse polinómio (a implementação está no anexo).

> **lagrangepol();**

Introduza o número de nós a serem utilizados

> **3;**

Introduza os nós

> **1,-1,2;**

Introduza os valores nodais

> **0,-3,4;**

O polinómio de Lagrange , L_1 , é, $-\frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{2}x + 1$

O polinómio de Lagrange , L_2 , é, $\frac{1}{6}x^2 - \frac{1}{2}x + \frac{1}{3}$

O polinómio de Lagrange , L_3 , é, $\frac{1}{3}x^2 - \frac{1}{3}$

O polinómio interpolador é $p(x) = \frac{5}{6}x^2 + \frac{3}{2}x - \frac{7}{3}$

Observação 1:

A fórmula de Lagrange pode não ser a representação mais conveniente do polinómio interpolador. Isto acontece, fundamentalmente por duas ordens de razões a saber:

1. É possível obter este polinómio com menos operações aritméticas que as requeridas por aquela fórmula;
2. Os polinómios de Lagrange estão associados a um conjunto de nós e uma mudança de posição ou do número destes nós altera completamente estes polinómios.

1.2.3. Diferenças Divididas

Definição 1.3.

Sejam x_0, x_1, \dots, x_n $n+1$ pontos distintos no intervalo $[a, b]$ e sejam y_0, y_1, \dots, y_n $n+1$ valores de uma função f nos pontos $x = x_i$, $i = 0, \dots, n$.

Define-se:

$$f[x_i] = y_i, \quad i = 0, \dots, n$$

$$f[x_0, x_1, \dots, x_n] = \frac{f[x_1, x_2, \dots, x_n] - f[x_0, x_1, \dots, x_{n-1}]}{x_n - x_0}, \quad \text{onde } f[x_0, x_1, \dots, x_n] \text{ é denominada}$$

diferença dividida de ordem n da função nos pontos x_0, x_1, \dots, x_n . (**Rodrigues, 2003, p.161**)

Para calcular as diferenças divididas de uma função f sobre os pontos x_0, x_1, \dots, x_n , constrói-se a seguinte tabela:

x_i	Ordem 0	Ordem 1	Ordem 2	...	Ordem n
x_0	$f[x_0]$				
x_1	$f[x_1]$	$f[x_0, x_1] = \frac{f[x_1] - f[x_0]}{x_1 - x_0}$	$f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0}$		
x_2	$f[x_2]$	$f[x_1, x_2] = \frac{f[x_2] - f[x_1]}{x_2 - x_1}$	$f[x_1, x_2, x_3] = \frac{f[x_2, x_3] - f[x_1, x_2]}{x_3 - x_1}$		
x_3	$f[x_3]$	$f[x_2, x_3] = \frac{f[x_3] - f[x_2]}{x_3 - x_2}$	$f[x_2, x_3, x_4] = \frac{f[x_3, x_4] - f[x_2, x_3]}{x_4 - x_2}$...	$f[x_0, \dots, x_n] = \frac{f[x_1, \dots, x_n] - f[x_0, \dots, x_{n-1}]}{x_n - x_0}$
x_4	$f[x_4]$	$f[x_3, x_4] = \frac{f[x_4] - f[x_3]}{x_4 - x_3}$	\vdots		
\vdots	\vdots	\vdots			
x_n	$f[x_n]$				

Tabela 1: Diferenças divididas

Teorema 1.4: Os coeficientes a_k do polinómio p de grau $\leq n$ que interpola os valores y_0, y_1, \dots, y_n nos nós distintos x_0, x_1, \dots, x_n são dados indutivamente pela expressão

$$a_k = f[x_0, x_1, \dots, x_k] = \frac{f[x_1, \dots, x_k] - f[x_0, \dots, x_{k-1}]}{x_k - x_0} \quad (\text{Pina, 1995, p.50}) \quad (11)$$

Demonstração:

Designemos por $p_{m,k}$ o polinómio de grau $\leq k$ que interpola os valores $y_m, y_{m+1}, \dots, y_{m+k}$ nos nós distintos $x_m, x_{m+1}, \dots, x_{m+k}$. Então, o polinómio

$$p(x) = \frac{x - x_0}{x_k - x_0} p_{1,k-1}(x) + \frac{x_k - x}{x_k - x_0} p_{0,k-1}(x) \quad (12)$$

é um polinómio de grau $\leq k$ que interpola os valores nodais y_0, y_1, \dots, y_k nos nós distintos x_0, x_1, \dots, x_k , como facilmente se pode verificar. Dado que este polinómio é único, p coincide necessariamente com p_k . Igualando os coeficientes dos termos de maior grau nos dois membros da expressão anterior, facilmente se conclui que

$$a_k = f[x_0, x_1, \dots, x_k] = \frac{f[x_1, \dots, x_k]}{x_k - x_0} - \frac{f[x_0, \dots, x_{k-1}]}{x_k - x_0}, \text{ o que prova a validade de (11).}$$

Nestas condições o polinómio interpolador, com diferenças divididas, assume a seguinte expressão:

$$p_n(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + \dots + f[x_0, x_1, \dots, x_n](x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1}) \quad (13)$$

A partir da expressão (11), temos em particular que:

$$\begin{aligned} f[x_0] &= f_0 \\ f[x_0, x_1] &= \frac{f[x_1] - f[x_0]}{x_1 - x_0} \\ f[x_0, x_1, x_2] &= \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0} \\ f[x_0, x_1, x_2, x_3] &= \frac{f[x_1, x_2, x_3] - f[x_0, x_1, x_2]}{x_3 - x_0}, \dots \end{aligned}$$

1.2.4. Fórmula de Newton

Seja f uma função com derivadas contínuas em $[a, b]$ até à ordem $n+1$.

Sejam $a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n = b$, $(n+1)$ pontos.

Construiremos o polinómio $p_n(x)$ que interpola $f(x)$ em x_0, x_1, \dots, x_n . Iniciaremos a construção obtendo $p_0(x)$ que interpola $f(x)$ em $x = x_0$. E assim, sucessivamente construiremos $p_k(x)$ que interpola $f(x)$ em x_0, x_1, \dots, x_k , $k = 0, 1, \dots, n$.

Seja $p_0(x)$ o polinómio de grau 0 (zero) que interpola $f(x)$ em $x = x_0$. Então, $p_0(x) = f[x_0]$.

Pela definição de diferenças divididas, temos que, para todo $x \in [a, b]$, $x \neq x_0$:

$$f[x_0, x] = \frac{f[x] - f[x_0]}{x - x_0}, \text{ para } x \neq x_0 \quad (0)$$

$$f[x_0, x_1, x] = \frac{f[x_0, x] - f[x_0, x_1]}{x - x_1}, \text{ para } x \neq x_0 \wedge x \neq x_1 \quad (1)$$

\vdots

$$f[x_0, x_1, \dots, x_n, x] = \frac{f[x_0, \dots, x_{n-1}, x] - f[x_0, x_1, \dots, x_n]}{x - x_n}, \text{ para } x \neq x_i, i = 0, \dots, n \quad (n)$$

$$\text{De (0) temos que: } f(x) = f[x_0] + (x - x_0)f[x_0, x] \quad (\#)$$

De (1) temos que, $f[x_0, x] = f[x_0, x_1] + (x - x_1)f[x_0, x_1, x]$ e substituindo em (#) temos que:

$$f(x) = f[x_0] + (x - x_0)f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1)f[x_0, x_1, x]$$

Aplicando o mesmo raciocínio para (2), ..., (n) teremos que:

$$p_n(x) = f[x_0] + (x - x_0)f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1)f[x_0, x_1, x] + \dots + (x - x_0) \cdot \dots \cdot (x - x_n)f[x_0, x_1, \dots, x_n, x] \quad (14)$$

(Ruggiero & Lopes, 1996, p. 223 a 228)

O polinómio acima definido chama-se polinómio de interpolação pela fórmula de Newton nos pontos x_0, x_1, \dots, x_n .

Exemplo 2: Determina o polinómio interpolador, na forma de Newton, que interpola os seguintes valores. (*aproveitando o exemplo 1*)

x_i	1	-1	2
y_i	0	-3	4

RESOLUÇÃO

Construindo a tabela de diferenças divididas, temos a seguinte:

x	$f[.]$	$f[.,.]$	$f[.,.,.]$
$x_0 = 1$	0		
		$\frac{3}{2}$	
$x_1 = -1$	-3		$\frac{5}{6}$
		$\frac{7}{3}$	
$x_2 = 2$	4		

$$f[x_0] = 0, \quad f[x_1] = -3, \quad f[x_2] = 4,$$

$$f[x_0, x_1] = \frac{f[x_1] - f[x_0]}{x_1 - x_0} = \frac{-3 - 0}{-1 - 1} = \frac{3}{2}$$

$$f[x_1, x_2] = \frac{f[x_2] - f[x_1]}{x_2 - x_1} = \frac{4 + 3}{2 + 1} = \frac{7}{3}$$

$$f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0} = \frac{\frac{7}{3} - \frac{3}{2}}{2 - 1} = \frac{5}{6}$$

O polinómio interpolador de Newton é dado por:

$$\begin{aligned} p_2(x) &= f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) \\ &= \frac{3}{2}(x - 1) + \frac{5}{6}(x - 1)(x + 1) \end{aligned}$$

Ou seja,

$$p_2(x) = \frac{5}{6}x^2 + \frac{3}{2}x - \frac{7}{3}$$

A implementação do algoritmo para a determinação das diferenças divididas no Maple 7 é feita através de uma matriz que depois fornece a expressão do polinómio interpolador. Segue a sua rotina no Maple 7 (a implementação está no anexo).

> **newtonpol();**

Quantos nós serão utilizados?

3;

Introduza o valor de cada um dos nós

1,-1,2;

Introduza os valores nodais

0,-3,4;

A MATRIZ CONTENDO AS DIFERENÇAS DIVIDIDAS É: ,
$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & \frac{3}{2} & \frac{5}{6} \\ -1 & -3 & \frac{7}{3} & 0 \\ 2 & 4 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

O polinómio interpolador de Newton é: $p(x) = \frac{3}{2}x - \frac{3}{2} + \frac{5}{6}(x-1)(x+1)$

Simplificado: $p(x) = \frac{3}{2}x - \frac{7}{3} + \frac{5}{6}x^2$

Observação 3: A ordem pela qual os nós são tomados é arbitrária. Se pretendêssemos acrescentar mais algum nó aos anteriores três, bastaria colocá-lo no fundo da tabela e calcular mais uma linha de valores. As diferenças divididas anteriormente obtidas não seriam afectadas. Se os valores nodais forem os valores nodais de uma função f , é possível estabelecer uma ligação importante entre as diferenças divididas de ordem k e a derivada da mesma ordem da função f .

1.2.5. Interpolação Inversa

Dada a tabela:

x	x_0	x_1	x_2	\dots	x_n
$f(x)$	$f(x_0)$	$f(x_1)$	$f(x_2)$	\dots	$f(x_n)$

O problema da interpolação inversa consiste em: dado $\bar{y} \in (f(x_0), f(x_n))$, obter \bar{x} , tal que $f(\bar{x}) = \bar{y}$.

Para se resolver este problema, considera-se dois casos:

- i) Obter $p_n(x)$ que interpola $f(x)$ em x_0, x_1, \dots, x_n e em seguida encontrar \bar{x} tal que $p_n(\bar{x}) = \bar{y}$.

Exemplo 3: Considera a seguinte tabela, encontrar \bar{x} tal que $f(\bar{x}) = 3$.

x	1,5	1,6	1,7	1,8	1,9	2,0
$f(x)$	2,35	2,76	3,02	3,34	3,77	4,01

RESOLUÇÃO

Como $3 \in (2,76; 3,02)$, usaremos interpolação linear sobre $x_0 = 1,6$ e $x_1 = 1,7$.

$$\begin{aligned} p_1(x) &= f(x_0) \frac{x-x_1}{x_0-x_1} + f(x_1) \frac{x-x_0}{x_1-x_0} \\ &= 2,76 \frac{x-1,7}{1,6-1,7} + 3,02 \frac{x-1,6}{1,7-1,6} \\ &= 2,76 \frac{x-1,7}{-0,1} + 3,02 \frac{x-1,6}{0,1} \\ &= -27,6(x-1,7) + 30,2(x-1,6) \\ &= -27,6x + 46,92 + 30,2x - 48,32 \\ &= 2,6x - 1,4 \end{aligned}$$

$$p_1(x) = 2,6x - 1,4$$

$$\text{Então, } p_1(\bar{x}) = 3 \Leftrightarrow 2,6\bar{x} - 1,4 = 3 \Leftrightarrow \bar{x} = \frac{4,4}{2,6} = 1,69230769$$

Neste caso, não conseguimos nem mesmo fazer uma estimativa do erro cometido, pois o que sabemos é medir o erro em se aproximar $f(x)$ por $p_n(x)$, e aqui queremos medir o erro cometido sobre x e não sobre $f(x)$.

ii) Interpolação inversa

Se $f(x)$ for invertível num intervalo contendo \bar{y} , então faremos a interpolação de $x = f^{-1}(y) = g(y)$.

Uma condição para que uma função contínua num intervalo $[a, b]$ seja invertível é que seja monótona crescente (ou decrescente) neste intervalo.

Se $f(x)$ for dada na forma de tabela, supondo que $f(x)$ é contínua em (x_0, x_n) , então $f(x)$ será admitida como monótona crescente se $f(x_0) < f(x_1) < \dots < f(x_n)$ e decrescente se $f(x_0) > f(x_1) > \dots > f(x_n)$.

Conforme dissemos acima, se a condição anterior for satisfeita, o problema de se obter \bar{x} tal que $f(\bar{x}) = \bar{y}$ será facilmente resolvido, se for obtido o polinômio $p_n(y)$ que interpola $g(y) = f^{-1}(x)$ sobre $[y_0, y_n]$.

Para isto, basta considerar x como função de y e aplicar um método de interpolação:

$$x = f^{-1}(y) = g(y) \approx p_n(y). \quad (\text{Ruggiero \& Lopes, 1996, p. 237 a 238})$$

1.2.6. Erros de Interpolação

Uma questão que é necessário resolver é a de saber que erro se comete quando se interpola uma função f por um polinômio p_n de grau $\leq n$ utilizando os nós distintos x_0, x_1, \dots, x_n .

Normalmente, o erro em aproximar a função $f(x)$ por um polinômio interpolador $p_n(x)$, de grau menor ou igual a n , é dado por:

$$E_n(x) = f(x) - p_n(x) \text{ para todo } x \text{ de } [x_0, x_n].$$

O estudo do erro é importante para sabermos quão próximo $f(x)$ está de $p_n(x)$.

Exemplo 4: Interpolação Linear de $f_1(x)$ e $f_2(x)$.

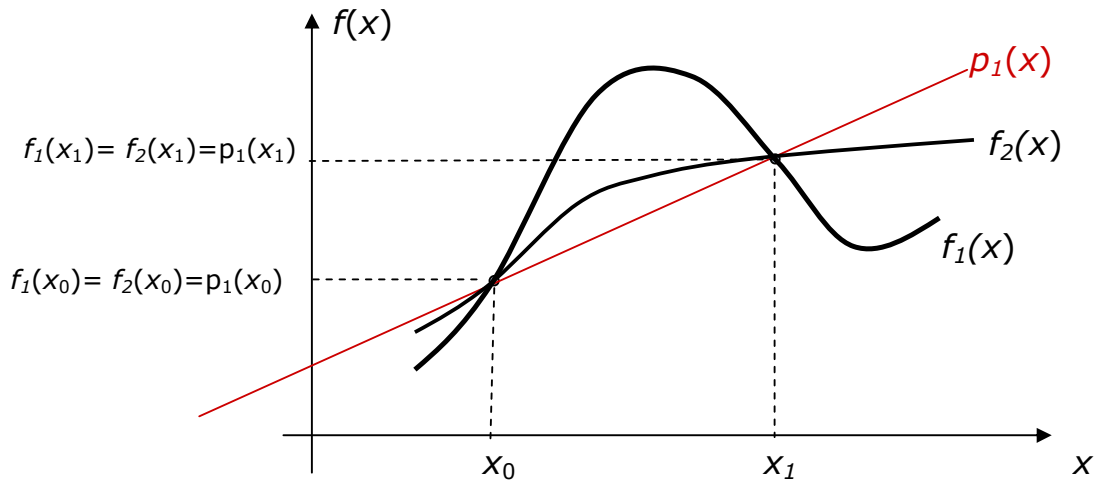


Figura 1: Interpolação linear (Ruggiero & Lopes, 1996, p.228)

- O mesmo polinômio $p_1(x)$ interpola $f_1(x)$ e $f_2(x)$ em x_0 e x_1 .
- O erro $E_1^1(x) = f_1(x) - p_1(x) > E_1^2(x) = f_2(x) - p_1(x)$ para todo x de (x_0, x_1) .
- O erro depende da concavidade da curva, ou seja, de $f_1''(x)$ e $f_2''(x)$.

Teorema 1.5:

Sejam $x_0 < x_1 < \dots < x_n$, $(n+1)$ pontos.

Seja $f(x)$ com derivadas até a ordem $(n+1)$ para todo x em $[x_0, x_n]$.

Seja $p_n(x)$ o polinômio interpolador de $f(x)$ nos pontos x_0, x_1, \dots, x_n .

Então, em qualquer ponto x pertencente ao intervalo $[x_0, x_n]$, o erro é dado por:

$$E_n(x) = f(x) - p_n(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n) \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}, \text{ onde } \xi_x \in (x_0, x_n). \quad (15)$$

(Ruggiero & Lopes, 1996, p. 229)

Demonstração:

Seja $w(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n)$, $\forall_{x \in [x_0, x_n]}$.

Então, para $x = x_i$, $i = 0, 1, \dots, n$, temos $f(x_i) = p_n(x_i)$, pois $w(x_i) = 0 \Rightarrow E_n(x_i) = 0$, neste caso o erro é obviamente nulo.

Vejamos agora o caso de $x \neq x_i$, $i = 0, 1, \dots, n$. Começando por considerar

$$w(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n)$$

Definimos uma função auxiliar:

$$\begin{aligned} F(x) &= e_n(x) - \frac{w(x)}{w(\hat{x})} e_n(\hat{x}) \\ &= f(x) - p_n(x) - \frac{w(x)}{w(\hat{x})} [f(\hat{x}) - p_n(\hat{x})]. \end{aligned}$$

A função $F(x)$ possui, pelo menos, os $(n+2)$ zeros em $[x_0, x_n]$. Aplicando sucessivamente o **Teorema de Rolle** (que diz: se f é uma função continua em $[a, b]$ com derivada finita em $[a, b]$ e $f(a) = f(b)$ então existe pelo menos um ponto $c \in]a, b[$ tal que $f'(c) = 0$), tem-se então:

$F'(x)$ possui pelo menos $n+1$ zeros em $[x_0, x_n]$;

$F''(x)$ possui pelo menos n zeros em $[x_0, x_n]$;

\vdots

$F^{n+1}(x)$ possui pelo menos 1 zero (seja ξ esse zero) em $[x_0, x_n]$.

Então, $F^{n+1}(\xi) = 0$, ou seja,

$$\begin{aligned} f^{n+1}(\xi) - \frac{(n+1)!}{w(\hat{x})} [f(\hat{x}) - p_n(\hat{x})] &= 0, \text{ pois, } p_n^{(n+1)} = 0 \text{ e } w^{(n+1)} = (n+1)! . \\ \Leftrightarrow f^{n+1}(\xi) w(\hat{x}) - (n+1)! [f(\hat{x}) - p_n(\hat{x})] &= 0 \\ \Leftrightarrow f^{n+1}(\xi) w(\hat{x}) &= (n+1)! [f(\hat{x}) - p_n(\hat{x})] \\ \Leftrightarrow f(\hat{x}) - p_n(\hat{x}) &= \frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!} w(\hat{x}) = E(\hat{x}) \end{aligned}$$

Substituindo \hat{x} por x , escrevemos que: $E_n(x) = f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} w(x)$, como queríamos provar.

Estimativa do Erro de Interpolação

Dada a função f , não podemos utilizar directamente a fórmula exacta do erro de interpolação devido ao facto de desconhecermos ξ . No entanto, podemos calcular um limite superior do erro de interpolação.

Uma estimativa do erro que por vezes é útil é a seguinte:

$$|e_n(x)| \leq \frac{1}{4(n+1)} |f^{(n+1)}(x)| h^{n+1}$$

em que h é o espaçamento máximo entre nós consecutivos. (Pina, 1995, p.55)

1.3. Interpolação de Hermite

A interpolação polinomial que se obtém das fórmulas de Lagrange ou Newton utiliza como única informação as abcissas e as ordenadas tabeladas. Se, adicionalmente, se dispuser de informação sobre as derivadas da função, pode melhorar-se a qualidade da aproximação aumentando-se o grau do polinómio interpolador. Essa técnica designa-se por interpolação de Hermite e, geralmente, apresenta uma menor tendência para comportamento osculatório. O objectivo desta presente secção é a determinação dos coeficientes do polinómio que interpole não só os valores da função mas também das derivadas.

Exemplo 5: Imaginemos que se registou a velocidade de um automóvel:

$t(s)$	$x(m)$	$v(m/s)$
0	0	0
1	4	6.5
2	24	15
3	57	21.1
4	100	28
5	150	30

Como sabemos, a velocidade é a primeira derivada do deslocamento em ordem ao tempo:

$v(t) = \frac{d}{dt} x(t)$, logo procuramos uma função que além de interpolar os deslocamentos (x)

também interpola as velocidades (v), assim estaremos a fazer uma interpolação de Hermite.

Suponhamos que pretendemos construir um polinómio p que interpole os valores da função f e da respectiva derivada f' . Este problema pode ser formulado como, dados os valores da função f e da sua derivada f' : $y_0, y_1, y_2, \dots, y_n$ e $y'_0, y'_1, y'_2, \dots, y'_n$, nos nós distintos x_0, x_1, \dots, x_n .

Calcular $p(x)$ de tal modo que:

$$p(x_i) = y_i \text{ e } p'(x_i) = y'_i, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n \quad (16)$$

À semelhança do que se fez na Interpolação de Lagrange, escrevamos o polinómio interpolador na seguinte forma:

$$p(x) = \sum_{k=0}^n [U_k(x)y_k + V_k(x)y'_k] \quad (17)$$

onde as funções $U_k(x)$ e $V_k(x)$ são polinómios a determinar. Estes deverão satisfazer o seguinte:

$$\begin{aligned} U_k(x_i) &= \delta_{ki}, & V_k(x_i) &= 0 \\ U'_k(x_i) &= 0, & V'_k(x_i) &= \delta_{ki} \end{aligned} \quad (18)$$

Como as expressões (16) consubstanciam $2(n+1)$ condições, é de esperar que o grau do polinómio interpolador seja $2n+1$. Vamos tentar chegar à sua expressão ensaiando a seguinte forma para os polinómios $U_k(x)$ e $V_k(x)$,

$$\begin{aligned} U_k(x) &= R_k(x)L_k^2(x) \\ V_k(x) &= S_k(x)L_k^2(x) \end{aligned} \quad (19)$$

onde R_k e S_k são polinómios de grau ≤ 1 e L_k são polinómios de Lagrange de grau n associados aos nós x_0, x_1, \dots, x_n . Introduzindo estas relações nas expressões (18), chegamos a

$$\begin{aligned} R_k(x_i)L_k^2(x_i) &= \delta_{ki} \\ R'_k(x_i)L_k^2(x_i) + 2R_k(x_i)L_k(x_i)L'_k(x_i) &= 0 \\ S_k(x_i)L_k^2(x_i) &= 0 \\ S'_k(x_i)L_k^2(x_i) + 2S_k(x_i)L_k(x_i)L'_k(x_i) &= \delta_{ki} \end{aligned}$$

Como sabemos, de acordo com o **teorema 1.3**, o símbolo δ_{ki} é designado por delta Kronecker e tem o seguinte significado:

$$\delta_{ki} = \begin{cases} 1 & \text{se } i = k \\ 0 & \text{se } i \neq k \end{cases}$$

Uma vez que L_k satisfazem a relação $L_k(x_i) = \delta_{ki}$, logo é fácil verificar que estas relações são identicamente verdadeiras para $i \neq k$. Para $i = k$ devemos ter que

$$\begin{aligned} R_k(x_k) &= 1, & R'_k(x_k) &= -2L_k(x_k) \\ S_k(x_k) &= 0, & S'_k(x_k) &= 1 \end{aligned}$$

Os polinómios de grau ≤ 1 que satisfazem estas equações são, como é fácil de ver,

$$\begin{aligned} R_k(x) &= 1 - 2L'_k(x_k)(x - x_k) \\ S_k(x) &= x - x_k \end{aligned} \quad (20)$$

Teorema 1.6: O polinómio de grau $\leq 2n+1$ que interpola os valores $y_0, y_1, y_2, \dots, y_n$ e as derivadas $y'_0, y'_1, y'_2, \dots, y'_n$ nos nós distintos x_0, x_1, \dots, x_n é

$$p(x) = \sum_{k=0}^n \left[\left(1 - 2L'_k(x_k)(x - x_k) \right) L_k^2(x) y_k + (x - x_k) L_k^2(x) y'_k \right]. \quad (\text{Pina, 1995, p. 70}) \quad (21)$$

O polinómio interpolador de Hermite também pode ser obtida na forma de Newton.

Para tal basta considerar que os nós x_0, x_1, \dots, x_n são substituídos pelos nós $x_0, x'_0, x_1, x'_1, \dots, x_n, x'_n$, e que faz tender x'_k para x_k , $k = 0, 1, \dots, n$, de tal modo que

$$\lim_{x'_k \rightarrow x_k} \overbrace{f[x_k, x'_k]}^{f[x_k, x_k]} = \lim_{x'_k \rightarrow x_k} \frac{f(x_k) - f(x'_k)}{x_k - x'_k} = f'(x_k).$$

O polinómio de Hermite na forma de Newton passa a escrever-se

$$\begin{aligned} H_{2n+1}(x) &= f(x_0) + f[x_0, x_0](x - x_0) + f[x_0, x_0, x_1](x - x_0)^2 + \\ &\quad f[x_0, x_0, x_1, x_1](x - x_0)^2(x - x_1) + \dots + \\ &\quad f[x_0, x_0, \dots, x_n, x'_n](x - x_0)^2(x - x_1)^2 \dots (x - x_{n-1})^2(x - x_n) \end{aligned} \quad (22)$$

Para o polinómio cúbico de Hermite podemos estabelecer uma tabela de **diferenças divididas** com a seguinte configuração:

x_i	f_i	$f[.,.]$ ou D	$f[.,.,.]$ ou D^2	$f[.,.,.,.]$ ou D^3
x_0	f_0			
		$f[x_0, x_0] = f'_0$		
x_0	f_0		$f[x_0, x_0, x_1]$	
		$f[x_0, x_1]$		$f[x_0, x_0, x_1, x_1]$
x_1	f_1		$f[x_0, x_1, x_1]$	
		$f[x_1, x_1] = f'_1$		
x_1	f_1			

Tabela 2: Polinómio cúbico de Hermite através de diferenças divididas

Exemplo 6: Com $f(x) = \ln(x)$, calcular uma aproximação para $f(1.5)$ usando interpolação

cúbica sabendo que: $f(1) = \ln(1) = 0$; $f'(1) = 1$ (uma vez que a
 $f(2) = \ln(2) = 0.693147$; $f'(2) = 0.5$

derivada de $f(x) = \ln(x)$ é $f'(x) = \frac{1}{x}$).

Usando o teorema do erro de interpolação, determina uma estimativa para o limite superior do erro absoluto cometido na aproximação.

RESOLUÇÃO

Para ser possível utilizar interpolação cúbica temos de recorrer à interpolação de Hermite.

O polinómio de Hermite na forma de Newton é dado pela expressão (22).

Construindo a tabela de diferenças divididas temos:

x_i	f_i	$f[.,.]$	$f[.,.,.]$	$f[.,.,.,.]$
$x_0 = 1$	$f_0 = 0$			
		1		
$x_0 = 1$	$f_0 = 0$		-0.306853	
		0.693147		0.113706
$x_1 = 2$	$f_1 = 0.693147$		-0.19314	
		0.5		
$x_1 = 2$	$f_1 = 0.693147$			

$$x_0 = 1, x_1 = 2$$

$$f[x_0, x_0] = f'_0 = 1$$

$$f[x_0, x_1] = \frac{f[x_1] - f[x_0]}{x_1 - x_0} = \frac{0.693147 - 0}{2 - 1} = 0.693147$$

$$f[x_1, x_1] = f'_1 = 0.5$$

$$f[x_0, x_0, x_1] = \frac{f[x_0, x_1] - f[x_0, x_0]}{x_1 - x_0} = \frac{0.693147 - 1}{2 - 1} = -0.306853$$

$$f[x_0, x_1, x_1] = \frac{f[x_1, x_1] - f[x_0, x_1]}{x_1 - x_0} = \frac{0.5 - 0.693147}{2 - 1} = -0.193147$$

$$f[x_0, x_0, x_1, x_1] = \frac{f[x_0, x_1, x_1] - f[x_0, x_0, x_1]}{x_1 - x_0} = \frac{-0.193147 - (-0.306853)}{2 - 1} = 0.113706$$

O polinómio interpolador de Hermite de grau ≤ 3 de f , na forma de Newton, é dado por:

$$H_3(x) = f(x_0) + f[x_0, x_0](x - x_0) + f[x_0, x_0, x_1](x - x_0)^2 + f[x_0, x_0, x_1, x_1](x - x_0)^2(x - x_1)$$

Assim,

$$H_3(x) = 0 + 1(x - 1) - 0.306853(x - 1)^2 + 0.113706(x - 1)^2(x - 2)$$

Portanto,

$$f(1.5) = \ln(1.5) = 0.405465... \text{ e}$$

$$H_3(1.5) = 0 + 1(1.5 - 1) - 0.306853(1.5 - 1)^2 + 0.113706(1.5 - 1)^2(1.5 - 2) = 0.409074$$

Logo $f(1.5) \approx H_3(1.5) = 0.409074$.

Estimativa do Erro

O teorema do erro de interpolação continua válido no caso da interpolação de Hermite. A função f deverá ser de classe $C^{2n+2}([a, b])$ e para qualquer $x \in [a, b]$, existe um $\xi \in (a, b)$, tal que:

$$e_{2n+1}(x) \equiv f(x) - H_{2n+1}(x) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} (x - x_0)^2 (x - x_1)^2 \dots (x - x_n)^2 \quad (23)$$

onde $(x - x_0)^2 (x - x_1)^2 \dots (x - x_n)^2 = w_n^2$.

Assim, do exemplo 6:

$$e_3(1.5) = \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!} (1.5 - 1)^2 (1.5 - 2)^2, \quad \xi \in (1, 2)$$

Sendo $\max_{x \in [1, 2]} |f^{(4)}(x)| = M$

Podemos escrever,

$$|e_3(1.5)| \leq \frac{M}{4!} 0.5^4$$

Mas,

$$f'(x) = \frac{1}{x}, \quad f''(x) = -\frac{1}{x^2}, \quad f'''(x) = \frac{2x}{x^4} = \frac{2}{x^3}, \quad f^{(4)}(x) = -\frac{6x^2}{x^6} = -\frac{6}{x^4}, \quad f^{(5)}(x) = \frac{24}{x^5}$$

Como a 4ª derivada é uma função monótona, o máximo coincide com o extremo do intervalo.

Verifica-se que:

$$\left|f^{(4)}(1)\right|=\left|-\frac{6}{1^4}\right|=6 \quad e \quad \left|f^{(4)}(2)\right|=\left|-\frac{6}{2^4}\right|=0.375$$

$$\text{Logo } \max_{x \in [1, 2]} \left|f^{(4)}(x)\right|=6$$

$$\text{Então, } \left|e_3(1.5)\right| \leq \frac{6}{4!} 0.5^4 \Leftrightarrow \left|e_3(1.5)\right| \leq 0.2 \times 10^{-1}.$$

1.4. Interpolação com Funções Spline (ou Interpolação Segmentada)

A origem do nome spline vem de uma régua elástica, usada em desenhos de engenharia, que pode ser curvada de forma a passar por um dado conjunto de pontos (x_i, y_i) , que tem o nome de spline.

A análise revelou que estas régua produziam curvas cuja equação era um polinómio do terceiro grau seccionalmente contínuo, concretamente com derivadas contínuas até à segunda ordem, mas com derivadas descontínuas da terceira ordem em diante.

A primeira definição rigorosa deste tipo de funções surge em 1946 por Schoenberg.

Matematicamente, Splines são definidas como sendo polinómios segmentados de grau n cujos valores da função e suas primeiras $n-1$ derivadas contínuas passam nos pontos onde se juntam.

A aproximação por Spline é uma interpolação através de uma classe de funções de coordenadas, as quais podem ser descritas como um conjunto de polinómios cúbicos segmentados com junções suavizados.

Em vez de aproximar uma dada função $f(x)$ sobre um intervalo (a, b) por um único polinómio, é possível dividir (a, b) em n subintervalos $(a, x_1), (x_1, x_2), \dots, (x_{n-1}, b)$ e aproximar $f(x)$ por um polinómio diferente em cada subintervalo.

Fazendo $y = f(x)$ ser a equação para a curva a qual é definida pela Spline e sob certas hipóteses (de acordo com a teoria da elasticidade) a curva definida pela régua pode ser descrita

aproximadamente como sendo uma função por partes, cada qual, um polinómio cúbico, de tal forma que $f(x)$ e suas duas primeiras derivadas são contínuas em qualquer ponto. A terceira derivada, entretanto, pode ter descontinuidades nos pontos x_i . Tal função é uma Spline cúbica interpoladora com os nós nos pontos x_i , de acordo com a definição que iremos ver mais adiante.

Se a função $f(x)$ está tabelada em $(n+1)$ pontos e a aproximarmos por um polinómio de grau n que a interpola sobre os pontos tabelados, o resultado dessa aproximação pode ser desastroso.

Uma alternativa é interpolar $f(x)$ em grupos de poucos pontos, obtendo-se polinómio de grau menor, e impor condições para que a função de aproximação seja contínua e tenha derivadas continua até uma certa ordem.

A ideia básica consiste em aplicar interpolação em cada segmento, usando diferentes polinómios interpoladores de baixo grau para interpolar sucessivos pares de dados.

Definição 1.4:

Considere a função $f(x)$ tabelada nos pontos $x_0 < x_1 < \dots < x_n$.

Uma função $S_p(x)$ é denominada spline de grau p com nós nos pontos x_i , $i = 0, 1, \dots, n$, se satisfazer as seguintes condições:

- a) Em cada subintervalo $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, 1, \dots, (n-1)$, $S_p(x)$ é um polinómio de grau p :

$$S_p(x).$$

- b) $S_p(x)$ é continua e tem derivada continua até a ordem $(p-1)$ em $[a, b]$.

Se, além disso, $S_p(x)$ também satisfaz a condição:

- c) $S_p(x_i) = f(x_i)$, $i = 0, 1, \dots, n$, então será denominada spline interpolador. (**Ruggiero &**

Lopes, 1996, p.245)

1.4.1. Spline Interpolador de Grau Zero

O Spline mais simples corresponde ao caso $m = 0$. De acordo com a definição, o Spline de grau $m = 0$ coincide em cada subintervalo Ω_i com uma constante e pertence a $C^{-1}(\bar{\Omega})$.

Definição 1.5: Designemos por S_i o polinómio de grau zero com o qual o Spline S de grau zero coincide em cada subintervalo $\Omega_i = [x_{i-1}, x_i[$. É óbvio que:

$S_i(x) = y_i, \quad x_{i-1} \leq x < x_i, \quad i = 1, 2, \dots, n,$ e em que y_i é o valor do Spline no subintervalo Ω_i .

Para construir este spline é preciso tomar uma opção relativamente à escolha dos valores dos y_i 's. Se o spline interpolar uma função $f \in C^1(\bar{\Omega})$ podemos escolher pontos $a_i \in \Omega_i$ e fazer $S_i(x) = f(a_i), \quad i = 1, 2, \dots, n$. Os casos mais vulgares são tomar o extremo esquerdo do subintervalo, i.e., $a_i = x_{i-1}$ ou o extremo direito, i.e., $a_i = x_i$, ou o ponto médio, i.e., $a_i = \frac{x_{i-1} + x_i}{2}$. (Pina, 1995, p.78)

Teorema 1.7: Seja $f \in C^1(\bar{\Omega})$ e $S \in p_{0,n}$. Então, o erro de interpolação de f por S é majorado por $\|e\|_{\infty} \leq \|f'\|_{\infty} h$, ou $\|e\|_{\infty} \leq \frac{1}{2} \|f'\|_{\infty} h$, no caso de os nós de interpolação coincidirem com os extremos dos subintervalos ou com os pontos médios dos subintervalos, respectivamente. (Pina, 1995, p.78)

1.4.2. Spline Interpolador Linear (ou Spline de grau um)

Definição 1.6:

A função spline linear interpolador de $f(x)$, $S_1(x)$, nos nós x_0, x_1, \dots, x_n pode ser escrita em cada subintervalo $[x_{i-1}, x_i]$, $i = 1, 2, \dots, n$ como

$$S_i(x) = f(x_{i-1}) \frac{x_i - x}{x_i - x_{i-1}} + f(x_i) \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}, \quad \forall x \in [x_{i-1}, x_i]. \quad (24)$$

Verificação:

- $S_1(x)$ é polinómio de grau 1 em cada subintervalo $[x_{i-1}, x_i]$, por definição;
- $S_1(x)$ é continua em (x_{i-1}, x_i) , por definição, e, nos nós x_i , realmente S_1 está bem definida, pois: $S_i(x) = S_{i+1}(x) = f(x_i) \Rightarrow S_1(x)$ é continua em $[a, b]$ e, portanto, $S_1(x)$ é spline linear;

- c) $S_1(x_i) = s_i(x_i) = f(x_i) \Rightarrow S_1(x)$ é spline linear interpolador de $f(x)$ nos nós x_0, x_1, \dots, x_n . (Ruggiero & Lopes, 1996, p.246)

Exemplo 7: Encontrar a função spline linear que interpola a função tabelada:

x	1	2	4	6
$f(x)$	1	3	2	2.5

RESOLUÇÃO

$$x_0 = 1, x_1 = 2, x_2 = 4, x_3 = 6$$

$$\begin{aligned} S_1(x) &= f(x_0) \frac{x_1 - x}{x_1 - x_0} + f(x_1) \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \\ &= 1 \frac{2 - x}{2 - 1} + 3 \frac{x - 1}{2 - 1} = 2 - x + 3x - 3 = 2x - 1, \quad x \in [1, 2] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} S_2(x) &= f(x_1) \frac{x_2 - x}{x_2 - x_1} + f(x_2) \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} \\ &= 3 \frac{4 - x}{4 - 2} + 2 \frac{x - 2}{4 - 2} = \frac{3}{2}(4 - x) + x - 2 = \frac{1}{2}(8 - x), \quad x \in [2, 4] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} S_3(x) &= f(x_2) \frac{x_3 - x}{x_3 - x_2} + f(x_3) \frac{x - x_2}{x_3 - x_2} \\ &= 2 \frac{6 - x}{6 - 4} + 2,5 \frac{x - 4}{6 - 4} = 6 - x + 2,5 \frac{x - 4}{2}, \quad x \in [4, 6] \end{aligned}$$

Teorema 1.8: seja $f \in C^2(\bar{\Omega})$ e $S \in P_{1,n}$. Então, o erro de interpolação de f por S é majorado por $\|e\|_{\infty} \leq \frac{1}{8} \|f''\|_{\infty} h^2$. (Pina, 1995, p.79)

1.4.3. Spline Interpolador Quadrático

A Spline linear apresenta a desvantagem de ter a primeira derivada descontínua nos nós.

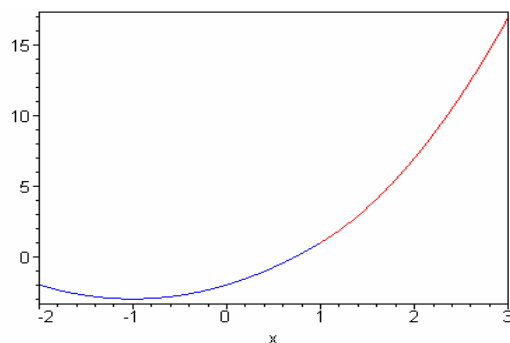
Se usarmos Splines quadráticas, teremos que $S_2(x)$ tem derivadas contínuas até ordem 1 e portanto a curvatura de $S_2(x)$ não é suave nos nós. (Ruggiero & Lopes, 1996, p.248)

Exemplo 8: Seja a função f definida por:

$$f(x) = \begin{cases} x^2 + 2x - 2 & \text{para } x \in [-2, 1] \\ 2x^2 - 1 & \text{para } x \in [1, 3] \end{cases}$$

Nota que a função f e sua primeira derivada são contínuas em $x = 1$. Contudo, sua segunda derivada, em $x = 1$, não é contínua.

Graficamente



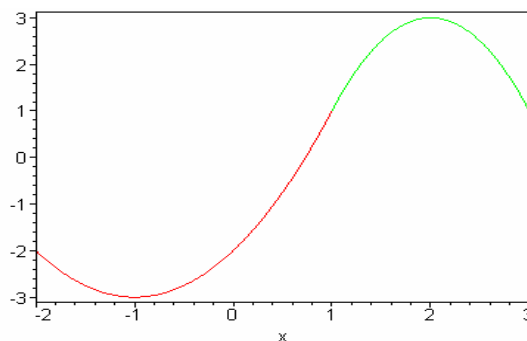
Graficamente, vemos a descontinuidade da segunda derivada (curvatura).

Considere agora a situação em que $f(x)$ e sua primeira derivada são contínuas em $x = 1$, contudo ocorre mudança de sinal da segunda derivada em $x = 1$.

Esta é situação que ocorre no ajuste de **spline quadrática**.

$$f(x) = \begin{cases} x^2 + 2x - 2 & \text{para } x \in [-2, 1] \\ -2x^2 + 8x - 5 & \text{para } x \in [1, 3] \end{cases}$$

Graficamente:



Para garantir que derivadas de ordem m sejam contínuas nos nós, têm de ser utilizados splines com ordem pelo menos $m + 1$. Polinômios de terceira ordem ou splines cúbicas garantem a continuidade das derivadas de primeira e segunda ordem e são muito utilizados na prática.

Vamos ilustrar o conceito de interpolação com splines utilizando polinômios de segunda ordem. Estes “splines quadráticos” têm primeira derivada contínua nos nós. Embora splines quadráticos não garantam segundas derivadas iguais nos nós, servem para demonstrar o procedimento geral para desenvolver splines de ordem superior.

O objectivo dos splines quadráticos é arranjar um polinómio de segunda ordem para intervalo entre valores. O polinómio para cada intervalo pode ser representado de um modo geral por:

$$S_i(x) = a_i x^2 + b_i x + c_i, \quad i = 1, \dots, n \quad (25)$$

Com $n+1$ pontos tem-se n intervalos e consequentemente $3n$ constantes desconhecidas.

Como tal são necessárias $3n$ equações para calcular as constantes desconhecidas.

Estas são:

1. O valor das funções tem que ser igual nos nós, i.é.,

$$S_i(x_i) = a_i x_i^2 + b_i x_i + c_i = f(x_i),$$

$$S_{i+1}(x_i) = a_{i+1} x_i^2 + b_{i+1} x_i + c_{i+1} = f(x_i), \quad i = 1, \dots, n-1$$

Como só os **nós interiores** são utilizados temos $n-1 + n-1 = 2n-2$ condições.

2. A primeira e a última função têm que passar nos **nós finais**.

$$S_1(x_0) = a_1 x_0^2 + b_1 x_0 + c_1 = f(x_0)$$

$$S_n(x_n) = a_n x_n^2 + b_n x_n + c_n = f(x_n)$$

Temos então mais duas condições.

3. A primeira derivada nos nós interiores tem de ser igual.

$$S'(x) = 2ax + b$$

$$S'_i(x_i) = 2a_i x_i + b_i = 2a_{i+1} x_i + b_{i+1} = S'_{i+1}(x_i), \quad i = 1, \dots, n-1$$

Temos então mais $n-1$ condições.

Até agora temos $2n-2 + 2 + n-1 = 3n-1$ condições. Como temos $3n$ constantes desconhecidas temos que arranjar mais uma condição. Se não tivermos mais nenhuma informação adicional sobre as funções e as suas derivadas, temos que fazer uma escolha arbitrária para calcular as constantes. Apesar das escolhas que podem ser feitas serem inúmeras, por simplicidade:

4. Assumimos que a segunda derivada da primeira função é zero. Como $S''_1(x) = 2a_1$ então $a_1 = 0$.

Exemplo 9: Ajustar um Spline Quadrático aos dados da tabela seguinte e usar o resultado para estimar em $x = 6$.

x	$f(x)$
3	2.5
4.5	1
7	2.5
9	0.5

RESOLUÇÃO

Temos $n = 3$ intervalos, como tal vamos ter $3n = 3 \times 3 = 9$ condições que são:

$$\left\{ \begin{array}{l} a_1 x_1^2 + b_1 x_1 + c_1 = f(x_1) \\ a_2 x_1^2 + b_2 x_1 + c_2 = f(x_1) \\ a_2 x_2^2 + b_2 x_2 + c_2 = f(x_2) \\ a_3 x_2^2 + b_3 x_2 + c_2 = f(x_2) \\ a_1 x_0^2 + b_1 x_0 + c_1 = f(x_0) \\ a_3 x_3^2 + b_3 x_3 + c_3 = f(x_3) \\ 2a_1 x_1 + b_1 = 2a_2 x_1 + b_2 \\ 2a_2 x_2 + b_2 = 2a_3 x_2 + b_3 \\ a_1 = 0 \end{array} \right. \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} a_1 (4.5)^2 + 4.5b_1 + c_1 = 1 \\ a_2 (4.5)^2 + 4.5b_2 + c_2 = 1 \\ a_2 (7)^2 + 7b_2 + c_2 = 2.5 \\ a_3 (7)^2 + 7b_3 + c_2 = 2.5 \\ a_1 (3)^2 + 3b_1 + c_1 = 2.5 \\ a_3 (9)^2 + 9b_3 + c_3 = 0.5 \\ 2 \times 4.5a_1 + b_1 = 2 \times 4.5a_2 + b_2 \\ 2 \times 7a_2 + b_2 = 2 \times 7a_3 + b_3 \\ a_1 = 0 \end{array} \right. \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} 20.25a_1 + 4.5b_1 + c_1 = 1 \\ 20.25a_2 + 4.5b_2 + c_2 = 1 \\ 49a_2 + 7b_2 + c_2 = 2.5 \\ 49a_3 + 7b_3 + c_3 = 2.5 \\ 9a_1 + 3b_1 + c_1 = 2.5 \\ 81a_3 + 9b_3 + c_3 = 0.5 \\ 9a_1 + b_1 = 9a_2 + b_2 \\ 14a_2 + b_2 = 14a_3 + b_3 \\ a_1 = 0 \end{array} \right.$$

Como $a_1 = 0$, o problema resume-se a resolver oito equações simultaneamente.

Em forma de matriz temos:

$$\begin{bmatrix} 4.5 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 20.25 & 4.5 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 49 & 7 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 49 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 81 & 9 & 1 \\ 1 & 0 & -9 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 14 & 1 & 0 & -14 & -1 & 0 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} b_1 \\ c_1 \\ a_2 \\ b_2 \\ c_2 \\ a_3 \\ b_3 \\ c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 2.5 \\ 2.5 \\ 2.5 \\ 0.5 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Resolvendo o sistema anterior obtém-se:

$$\begin{aligned} a_1 &= 0, \quad b_1 = -1, \quad c_1 = 5.5, \quad a_2 = 0.64, \quad b_2 = -6.76, \quad c_2 = 18.46 \\ a_3 &= -1.6, \quad b_3 = 24.6, \quad c_3 = -91.3 \end{aligned}$$

Temos então os splines quadráticos:

$$S_1(x) = -x + 5.5, \quad x \in [3, 4.5]$$

$$S_2(x) = 0.64x^2 - 6.76x + 18.46, \quad x \in [4.5, 7]$$

$$S_3(x) = -1.6x^2 + 24.6x - 91.3, \quad x \in [7, 9]$$

Como $6 \in [4.5, 7]$.

Logo, temos então que $S_2(6) = 0.64 \times 6^2 - 6.76 \times 6 + 18.46 = 0.94$.

Como podemos constatar, se usarmos Splines quadráticos, teremos que $S_2(x)$ tem derivadas contínuas apenas até a ordem 1 e, portanto, a curvatura de $S_2(x)$ pode trocar nos nós. Por esta razão, os Splines quadráticos são poucos utilizados.

1.4.4. Spline Interpolador Cúbico

Matematicamente é possível construir funções polinomiais de grau ≤ 3 , $S_k(x)$, em cada intervalo $[x_k, x_{k+1}]$, de tal forma que a curva segmentada resultante S_3 e as suas primeira e segunda derivadas sejam contínuas em todo o intervalo $[x_0, x_n]$.

A spline linear apresenta a desvantagem de ter a primeira derivada descontínua nos nós.

Se usarmos splines quadráticas, teremos que $S_2(x)$ tem derivadas contínuas apenas até a ordem 1 e, portanto, a curvatura de $S_2(x)$ pode trocar nos nós. Por esta razão, as splines cúbicas são as mais usadas.

Uma spline cúbica $S_3(x)$ é uma função polinomial por partes, contínua, onde cada parte $S_k(x)$ é um polinômio de grau 3 nos intervalos $[x_{k-1}, x_k]$.

Como $S_3(x)$ tem primeira e segunda derivadas contínuas, logo não tem bicos e não troca a curvatura nos nós.

O objectivo da interpolação por spline cúbica é obter uma fórmula de interpolação que é suave na primeira derivada e contínua na segunda derivada (tanto no interior do intervalo como na fronteira).

Definição 1.7: Dada a função f definida em $[a, b]$ e um conjunto de números, $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$, define-se uma spline cúbica interpoladora de f , a função S que satisfaça as condições:

- a) S é um polinómio cúbico, representado por S_k no subintervalo $[x_k, x_{k+1}]$ para cada $k = 0, 1, \dots, n-1$
- b) $S(x_k) = f(x_k)$, $k = 0, 1, \dots, n$
- c) $S_{k+1}(x_{k+1}) = S_k(x_{k+1})$, $k = 0, 1, \dots, n-2$
- d) $S'_{k+1}(x_{k+1}) = S'_k(x_{k+1})$, $k = 0, 1, \dots, n-2$

e) $S''_{k+1}(x_{k+1}) = S''_k(x_{k+1}), \quad k = 0, 1, \dots, n-2$

f) Uma das condições é satisfeita se:

- $S''(x_0) = S''(x_n) = 0$ – **Spline cúbica natural**

Ou

- $S'(x_0) = f'(x_0) \quad \wedge \quad S'(x_n) = f'(x_n)$ – **Spline cúbica completo**

Construção da spline cúbica

Para construirmos a spline cúbica teremos de aplicar as condições anteriormente referidas à definição de polinómio cubico:

$$S_k(x) = a_k + b_k(x - x_k) + c_k(x - x_k)^2 + d_k(x - x_k)^3, \quad k = 0, 1, \dots, n-1 \quad (26)$$

Consideremos: $h_k = x_{k+1} - x_k$

Aplicando a condição **b)**, temos que:

$$S(x_k) = S_k(x_k) = f(x_k)$$

$$S_k(x_k) = a_k + \underbrace{b_k(x_k - x_k)}_0 + \underbrace{c_k(x_k - x_k)^2}_0 + \underbrace{d_k(x_k - x_k)^3}_0 =$$

$$S_k(x_k) = f(x_k) = a_k, \quad k = 0, 1, \dots, n-2$$

Aplicando a condição **c)**

$$S_{k+1}(x_{k+1}) = S_k(x_{k+1})$$

$$S_{k+1}(x_{k+1}) = a_{k+1} + \underbrace{b_{k+1}(x_{k+1} - x_{k+1})}_0 + \underbrace{c_{k+1}(x_{k+1} - x_{k+1})^2}_0 + \underbrace{d_{k+1}(x_{k+1} - x_{k+1})^3}_0 = a_{k+1}$$

$$S_k(x_{k+1}) = a_k + b_k(x_{k+1} - x_k) + c_k(x_{k+1} - x_k)^2 + d_k(x_{k+1} - x_k)^3$$

$$a_{k+1} = a_k + b_k h_k + c_k h_k^2 + d_k h_k^3, \quad k = 0, 1, \dots, n-1$$

Sabendo que a derivada de $S(x)$ é:

$$S'_k(x) = b_k + 2c_k(x - x_k) + 3d_k(x - x_k)^2, \quad k = 0, 1, \dots, n-1$$

Aplicando a condição **d)**

$$S'_{k+1}(x_{k+1}) = S'_k(x_{k+1}), \quad k = 0, 1, \dots, n-2$$

$$S'_k(x_{k+1}) = b_k + 2c_k(x_{k+1} - x_k) + 3d_k(x_{k+1} - x_k)^2$$

$$S'_{k+1}(x_{k+1}) = b_{k+1} + \underbrace{2c_{k+1}(x_{k+1} - x_{k+1})}_0 + \underbrace{3d_{k+1}(x_{k+1} - x_{k+1})^2}_0$$

$$S'_{k+1}(x_{k+1}) = b_{k+1} = b_k + 2c_k h_k + 3d_k h_k^2$$

$$\text{Então, } b_{k+1} = b_k + 2c_k h_k + 3d_k h_k^2, \quad k = 0, 1, \dots, n-1$$

Calculando a 2ª derivada de $S(x)$, obtemos:

$$S''_k(x) = 2c_k + 6d_k(x - x_k), \quad k = 0, 1, \dots, n-1$$

Aplicando a condição e), teremos

$$S''_{k+1}(x_{k+1}) = 2c_{k+1} + \underbrace{6d_{k+1}(x_{k+1} - x_{k+1})}_0 = 2c_{k+1}$$

$$S''_k(x_{k+1}) = 2c_k + 6d_k(x_{k+1} - x_k)$$

$$S''_{k+1}(x_{k+1}) = S''_k(x_{k+1}) = 2c_{k+1} = 2c_k + 6d_k h_k$$

$$\text{Então, } c_{k+1} = c_k + 3d_k h_k, \quad k = 0, 1, \dots, n-1$$

Assim, chegamos às expressões:

$$(1) \quad a_{k+1} = a_k + b_k h_k + c_k h_k^2 + d_k h_k^3 \quad k = 0, 1, \dots, n-1$$

$$(2) \quad b_{k+1} = b_k + 2c_k h_k + 3d_k h_k^2, \quad k = 0, 1, \dots, n-1$$

$$(3) \quad c_{k+1} = c_k + 3d_k h_k, \quad k = 0, 1, \dots, n-1$$

De (3) obtém-se

$$d_k = \frac{c_{k+1} - c_k}{3h_k} \text{ e substituindo em (1) e em (2), obtemos}$$

$$\begin{cases} a_{k+1} = a_k + b_k h_k + c_k h_k^2 + \frac{c_{k+1} - c_k}{3h_k} h_k^3 \\ b_{k+1} = b_k + 2c_k h_k + 3 \frac{c_{k+1} - c_k}{3h_k} h_k^2 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} a_{k+1} = a_k + b_k h_k + c_k h_k^2 + \left(\frac{c_{k+1} - c_k}{3} \right) h_k^2 \\ b_{k+1} = b_k + 2c_k h_k + c_{k+1} h_k - c_k h_k \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} a_{k+1} = a_k + b_k h_k + \frac{h_k^2}{3} (2c_k + c_{k+1}), \\ b_{k+1} = b_k + (c_k + c_{k+1}) h_k \end{cases}, \quad k = 0, 1, \dots, n-1$$

Este sistema pode ser reduzido a uma equação sabendo que a 2ª equação também se escreve

$$(a) \quad b_k = b_{k-1} + (c_{k-1} + c_k) h_{k-1} \quad (*)$$

E que da 1ª equação do sistema se obtém:

$$a_{k+1} = a_k + b_k h_k + \frac{h_k^2}{3} (2c_k + c_{k+1}) \Leftrightarrow$$

$$b_k = \frac{a_{k+1} - a_k}{h_k} - \frac{h_k}{3} (2c_k + c_{k+1})$$

e

$$b_{k-1} = \frac{a_k - a_{k-1}}{h_{k-1}} - \frac{h_{k-1}}{3} (2c_{k-1} + c_k)$$

Substituindo estas duas expressões em (a), obtém-se

$$h_{k-1}c_{k-1} + 2(h_{k-1} + h_k)c_k + h_k c_{k+1} = \frac{3}{h_k}(a_{k+1} - a_k) - \frac{3}{h_{k-1}}(a_k - a_{k-1}), \quad k = 1, 2, \dots, n-1$$

Esta expressão representa um sistema de equações lineares de $n-1$ equações e $n+1$ incógnitas c_0, c_1, \dots, c_n .

$$\begin{cases} h_0 c_0 + 2(h_0 + h_1)c_1 + h_1 c_2 = \frac{3}{h_1}(a_2 - a_1) - \frac{3}{h_0}(a_1 - a_0) \\ h_1 c_1 + 2(h_1 + h_2)c_2 + h_2 c_3 = \frac{3}{h_2}(a_3 - a_2) - \frac{3}{h_1}(a_2 - a_1) \\ \dots \\ h_{n-2}c_{n-2} + 2(h_{n-2} + h_{n-1})c_{n-1} + h_{n-1}c_n = \frac{3}{h_{n-1}}(a_n - a_{n-1}) - \frac{3}{h_{n-2}}(a_{n-1} - a_{n-2}) \end{cases}$$

Para se resolver este sistema necessitamos de mais 2 equações. Aplicando então a condição **f)**:

$$(I) \text{ spline natural: } S''(x_0) = S''(x_n) = 0$$

$$S''(x_0) = 2c_0 + 6d_0(x_0 - x_0) \Rightarrow c_0 = 0$$

$$S''(x_n) = 2c_n + 6d_n(x_n - x_n) \Rightarrow c_n = 0$$

E o sistema será:

$$\begin{cases} c_0 = 0 \\ h_0 c_0 + 2(h_0 + h_1)c_1 + h_1 c_2 = \frac{3}{h_1}(a_2 - a_1) - \frac{3}{h_0}(a_1 - a_0) \\ h_1 c_1 + 2(h_1 + h_2)c_2 + h_2 c_3 = \frac{3}{h_2}(a_3 - a_2) - \frac{3}{h_1}(a_2 - a_1) \\ \dots \\ h_{n-2}c_{n-2} + 2(h_{n-2} + h_{n-1})c_{n-1} + h_{n-1}c_n = \frac{3}{h_{n-1}}(a_n - a_{n-1}) - \frac{3}{h_{n-2}}(a_{n-1} - a_{n-2}) \\ c_n = 0 \end{cases}$$

Este sistema de equações pode ser escrito na forma matricial:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ h_0 & 2(h_0 + h_1) & h_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & h_1 & 2(h_1 + h_2) & h_2 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & & & & & & \\ & & & \dots & 0 & h_{n-2} & 2(h_{n-2} + h_{n-1}) & h_{n-1} & 0 \\ 0 & & & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_{n-1} \\ c_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{3}{h_1}(a_2 - a_1) - \frac{3}{h_0}(a_1 - a_0) \\ \frac{3}{h_2}(a_3 - a_2) - \frac{3}{h_1}(a_2 - a_1) \\ \dots \\ \frac{3}{h_{n-1}}(a_n - a_{n-1}) - \frac{3}{h_{n-2}}(a_{n-1} - a_{n-2}) \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$Ac = b,$$

que será resolvido $c = A^{-1}b$. c_0, c_1, \dots, c_n são as incógnitas a determinar, A e b são conhecidos.

$$\text{(II) spline completa: } S'(x_0) = f'(x_0) \quad \wedge \quad S'(x_n) = f'(x_n)$$

$$S'(x_0) = f'(x_0) = b_0 + \underbrace{2c_0(x_0 - x_0)}_0 + \underbrace{3d_0(x_0 - x_0)^2}_0 = b_0$$

$$S'(x_n) = f'(x_n) = b_n + \underbrace{2c_n(x_n - x_n)}_0 + \underbrace{3d_n(x_n - x_n)^2}_0 = b_n$$

Mas como

$$b_k = \frac{a_{k+1} - a_k}{h_k} - \frac{h_k}{3} (2c_k + c_{k+1})$$

Logo,

$$f'(x_0) = b_0 = \frac{a_1 - a_0}{h_0} - \frac{h_0}{3} (2c_0 + c_1)$$

e portanto

$$2h_0c_0 + h_0c_1 = \frac{3}{h_0} (a_1 - a_0) - 3f'(x_0)$$

Também, pelo (*)

$$b_k = b_{k-1} + h_{k-1} (c_{k-1} + c_k)$$

Logo

$$(b) \quad f'(x_n) = b_n = b_{n-1} + h_{n-1} (c_{n-1} + c_n)$$

como

$$b_k = \frac{a_{k+1} - a_k}{h_k} - \frac{h_k}{3} (2c_k + c_{k+1})$$

e

$$b_{n-1} = \frac{a_n - a_{n-1}}{h_{n-1}} - \frac{h_{n-1}}{3} (2c_{n-1} + c_n) \quad (**)$$

Substituindo esta 2ª expressão (**) em (b) obtém-se,

$$f'(x_n) = \frac{a_n - a_{n-1}}{h_{n-1}} - \frac{h_{n-1}}{3} (2c_{n-1} + c_n) + h_{n-1} (c_{n-1} + c_n)$$

e finalmente

$$\begin{aligned} f'(x_n) &= \frac{a_n - a_{n-1}}{h_{n-1}} - \frac{h_{n-1}}{3} (2c_{n-1} + c_n) + h_{n-1} (c_{n-1} + c_n) \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow 3h_{n-1}f'(x_n) = 3(a_n - a_{n-1}) - h_{n-1}^2 (2c_{n-1} + c_n) + 3h_{n-1}^2 (c_{n-1} + c_n) \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow h_{n-1}^2 c_{n-1} + 2h_{n-1}^2 c_n = 3(a_n - a_{n-1}) - 3h_{n-1}f'(x_n) \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow h_{n-1}c_{n-1} + 2h_{n-1}c_n = \frac{3}{h_{n-1}} (a_n - a_{n-1}) - 3f'(x_n), \quad k = 1, 2, \dots, n-1 \end{aligned}$$

$$\text{O sistema será: } \begin{cases} h_0 c_0 + 2h_0 c_1 = \frac{3}{h_0} (a_1 - a_0) - 3f'(x_0) \\ h_0 c_0 + 2(h_0 + h_1) c_1 + h_1 c_2 = \frac{3}{h_1} (a_2 - a_1) - \frac{3}{h_0} (a_1 - a_0) \\ h_1 c_1 + 2(h_1 + h_2) c_2 + h_2 c_3 = \frac{3}{h_2} (a_3 - a_2) - \frac{3}{h_1} (a_2 - a_1) \\ \dots \\ h_{n-2} c_{n-2} + 2(h_{n-2} + h_{n-1}) c_{n-1} + h_{n-1} c_n = \frac{3}{h_{n-1}} (a_n - a_{n-1}) - \frac{3}{h_{n-2}} (a_{n-1} - a_{n-2}) \\ h_{n-1} c_{n-1} + 2h_{n-1} c_n = \frac{3}{h_{n-1}} (a_n - a_{n-1}) - 3f'(x_n) \end{cases}$$

Este sistema de equações pode ser escrito também na forma matricial.

Exemplo 10: Calcular um spline cúbica natural que interpola os pontos:

x_k	1	2	5	6	8
$f(x_k)$	2	3	1	2	3

RESOLUÇÃO

Uma vez que a spline cúbica é dada pela expressão:

$$S_k(x) = a_k + b_k(x - x_k) + c_k(x - x_k)^2 + d_k(x - x_k)^3, \quad k = 0, 1, \dots, n-1$$

Temos que calcular os a_k, b_k, c_k e d_k , $k = 0, 1, \dots, n-1$, que constituem os coeficientes dos polinómios S_k .

- Como sabemos os a_k **são calculados de** $a_k = f(x_k)$

$$\text{Então } a_0 = 2, a_1 = 3, a_2 = 1, a_3 = 2, a_4 = 3$$

- Os h_k são calculados de $h_k = x_{k+1} - x_k$

$$h_0 = 1, h_1 = 3, h_2 = 1 \quad e \quad h_4 = 2$$

Estamos em condições de calcular a matriz A e o vector b.

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ h_0 & 2(h_0 + h_1) & h_1 & 0 \\ 0 & h_1 & 2(h_1 + h_2) & h_2 \\ 0 & 0 & h_2 & 2(h_2 + h_3) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 8 & 3 & 0 \\ 0 & 3 & 8 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 6 \end{bmatrix}$$

$$b = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{3}{h_1}(a_2 - a_1) - \frac{3}{h_0}(a_1 - a_0) \\ \frac{3}{h_2}(a_3 - a_2) - \frac{3}{h_1}(a_2 - a_1) \\ \frac{3}{h_3}(a_4 - a_3) - \frac{3}{h_2}(a_3 - a_2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -5 \\ 5 \\ -1.5 \end{bmatrix}$$

Depois calculamos os c_k

$$c = A^{-1} \cdot b$$

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{47}{322} & \frac{47}{322} & -\frac{9}{161} & \frac{3}{322} \\ \frac{9}{161} & -\frac{9}{161} & \frac{24}{161} & -\frac{4}{161} \\ -\frac{3}{322} & \frac{3}{322} & -\frac{4}{161} & \frac{55}{322} \end{bmatrix}$$

$$c = A^{-1} \cdot b = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{47}{322} & \frac{47}{322} & -\frac{9}{161} & \frac{3}{322} \\ \frac{9}{161} & -\frac{9}{161} & \frac{24}{161} & -\frac{4}{161} \\ -\frac{3}{322} & \frac{3}{322} & -\frac{4}{161} & \frac{55}{322} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ -5 \\ 5 \\ -1.5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -1.022 \\ 1.061 \\ -1.3 \end{bmatrix}$$

Agora vêm os b_k

$$b_k = \frac{a_{k+1} - a_k}{h_k} - \frac{h_k}{3}(2c_k + c_{k+1})$$

$$b_0 = \frac{a_1 - a_0}{h_0} - \frac{h_0}{3}(2c_0 + c_1) = \frac{1}{1} - \frac{1}{3}(2 \times 0 - 1.022) = 1.307$$

$$b_1 = \frac{a_2 - a_1}{h_1} - \frac{h_1}{3}(2c_1 + c_2) = -\frac{2}{3} - \frac{3}{3}(2 \times (-1.022) + 1.061) = 0.383$$

$$b_2 = \frac{a_3 - a_2}{h_2} - \frac{h_2}{3}(2c_2 + c_3) = \frac{1}{1} - \frac{1}{3}(2 \times 1.061 - 1.3) = 0.753$$

$$b_3 = \frac{a_4 - a_3}{h_3} - \frac{h_3}{3}(2c_3 + c_4) = \frac{1}{2} - \frac{2}{3}(2 \times (-1.3) + 0) = 2.06$$

$$\text{Então, } b = \begin{bmatrix} 1.307 \\ 0.383 \\ 0.753 \\ 2.06 \end{bmatrix}$$

E por último calculamos os d_k , $k = 0, \dots, n-1$

$$d_k = \frac{c_{k+1} - c_k}{3h_k}$$

$$d_0 = \frac{c_1 - c_0}{3h_0} = \frac{-1.022 - 0}{3 \times 1} = 0.341$$

$$d_1 = \frac{c_2 - c_1}{3h_1} = \frac{1.061 - (-1.022)}{3 \times 3} = 0.231$$

$$d_2 = \frac{c_3 - c_2}{3h_2} = \frac{-1.3 - 1.061}{3 \times 1} = -0.787$$

$$d_3 = \frac{c_4 - c_3}{3h_3} = \frac{0 - (-1.3)}{3 \times 2} = 0.217$$

$$\text{Logo, } d = \begin{bmatrix} 0.341 \\ 0.231 \\ -0.787 \\ 0.217 \end{bmatrix}$$

O resultado é

$$S_k(x) = a_k + b_k(x - x_k) + c_k(x - x_k)^2 + d_k(x - x_k)^3, \quad k = 0, 1, \dots, n-1$$

Como temos 4 subdivisões do intervalo $[1, 8]$, donde $n = 4$, e portanto temos de determinar

$S_0(x)$, $S_1(x)$, $S_2(x)$ e $S_3(x)$, para $0 \leq k \leq 3$ ($n-1 = 3$).

$$\begin{aligned} S_0(x) &= a_0 + b_0(x - x_0) + c_0(x - x_0)^2 + d_0(x - x_0)^3 \\ &= 2 + 0(x - 1) - 0(x - 1)^2 + 0.341(x - 1)^3 = 2 + 0.341(x - 1)^3, \quad x \in [1, 2] \end{aligned}$$

$$S_1(x) = 3 - 5(x - 2) - 1.022(x - 2)^2 + 0.231(x - 2)^3, \quad x \in [2, 5]$$

$$S_2(x) = 1 + 5(x - 5) + 1.061(x - 5)^2 - 0.787(x - 5)^3, \quad x \in [5, 6]$$

$$S_3(x) = 2 - 1.5(x - 6) - 1.3(x - 6)^2 + 0.217(x - 6)^3, \quad x \in [6, 8]$$

Erro de Interpolação para funções Spline Cúbicas

Teorema 1.9: seja $f \in C^4[x_0, x_n]$ e $x_0 < x_1 < \dots < x_n$. Seja S_3 a função spline cúbica interpoladora de f em x_0, x_1, \dots, x_n . Se

$$\max_{x \in [x_0, x_n]} |f^{(4)}(x)| \leq M$$

e se

$$h = \max_{0 \leq i \leq n-1} (x_{i+1} - x_i)$$

então

$$\max_{x \in [x_0, x_n]} |f(x) - S_3(x)| \leq \frac{5}{384} M h^4$$

e

$$\max_{x \in [x_0, x_n]} |f'(x) - S_3'(x)| \leq \frac{1}{24} M h^3.$$

CAPÍTULO II – INTEGRAÇÃO NUMÉRICA

2.1. Introdução

Dada uma função f definida num intervalo finito $[a, b]$, desejamos calcular o integral definido por

$$\int_a^b f(x)dx \quad , \quad (27)$$

admitindo que f é integrável. Se $f(x) \geq 0$ em $[a, b]$, o integral (27) tem o valor de área limitada pela curva $y = f(x)$, pelo eixo dos XX e as rectas $x = a$ e $x = b$.

Se for possível encontrar uma função F tal que $F' = f$ então podemos calcular o valor do integral utilizando a relação

$$\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a) .$$

Muitas vezes não é possível encontrar uma função F , e, mesmo se F for encontrada, pode ainda assim tornar-se mais conveniente a utilização dum método numérico para estimar o valor de (27), principalmente no caso de F exigir grande esforço de computação. Se não é possível determinar F ou se f for conhecido apenas num número finito de pontos x_i , utilizamos métodos numéricos, que estudaremos neste capítulo, para aproximar o valor de (27).

O processo óbvio consiste em substituir a função integranda f de (27) por um polinómio interpolador p que a aproxima e integrar o polinómio. (Rosa, 1983, p.119)

Definição 2.1:

Seja $f(x)$ uma função contínua num intervalo $[a, b]$. Seja $F(x)$ a sua primitiva. Então, a

integral de $f(x)$ no intervalo $[a, b]$ é dado por: $\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a)$.

A ideia básica de integração numérica é a substituição da função $f(x)$ por um polinómio que a aproxime razoavelmente no intervalo $[a, b]$. Assim o problema seria resolvido pela integração

trivial de polinómios. Com este raciocínio queremos uma fórmula para aproximar $\int_a^b f(x)dx$ do

tipo:

$$\int_a^b f(x)dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + \dots + A_n f(x_n), \quad x_i \in [a, b], \quad i = 0, 1, \dots, n. \text{ onde os } A_i \text{ são}$$

chamados pesos da regra. (Ruggiero & Lopes, 2003, p. 210)

Como podemos constatar, a integração numérica implica substituir o integral por uma soma, fazendo-nos lembrar o Integral de Rieman.

Exemplo 11: Um exemplo simples é aproximar a função por rectas interpoladoras nos pontos a e b .

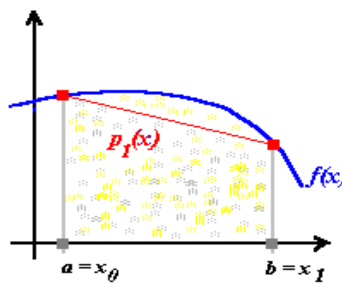


Figura 2: Regra de trapézio

Claro que, neste caso, a aproximação pode estar desajustada, e podemos melhorar a aproximação, usando, por exemplo, um polinómio de grau superior ou um spline linear.

Interesse da integração numérica:

- Quando não se conhece expressão analítica de f ;
- Quando não conhecem expressões analíticas de primitivas de f ;
- Quando o cálculo de primitivas de f é dispendioso.

NOTA 1: De acordo com o valor de n (número de nós) e da localização dos nós no intervalo $[a, b]$, assim é obtido as diferentes regras de integração.

2.2. Regras básicas

Consistem em aproximar o integral de f em $[a, b]$ pelo integral de um polinómio interpolador de f num conjunto de nós em $[a, b]$.

Seja p_n o polinómio de grau $\leq n$ que interpola f nos nós $x_0 < x_1 < \dots < x_n$, pertencentes a $[a, b]$. Representando este polinómio na forma de Lagrange, obtém-se

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i) L_i(x),$$

onde L_i são os polinómios de Lagrange. Então,

$$I(p_n) = \int_a^b p_n(x) dx = \int_a^b \left(\sum_{i=0}^n f(x_i) L_i(x) \right) dx = \sum_{i=0}^n f(x_i) \int_a^b L_i(x) dx.$$

Definindo A_i , para $i = 0, 1, \dots, n$, como $A_i = \int_a^b L_i(x) dx$, verifica-se que $I(p_n) = \sum_{i=0}^n A_i f(x_i)$, e

logo o integral de f será aproximado da seguinte forma

$$I(f) \approx \sum_{i=0}^n A_i f(x_i),$$

ou seja, por uma combinação linear dos valores de f nos nós. Os coeficientes (A_i) desta combinação linear (também designados por pesos) apenas dependem dos nós escolhidos.

Escolhendo diferentes números de nós e diferentes localizações destes obtém-se diferentes regras de integração que em seguida iremos estudar.

2.2.1. Regras de rectângulo

Nestas regras, o intervalo de integração $[a, b]$, é particionado em subintervalos no interior de cada qual a função integrando é aproximada por um polinómio de grau zero, isto é, por uma constante adequada.

Suponha-se que o intervalo de integração se encontra particionado num único subintervalo. Então, o procedimento descrito anteriormente conduz-nos às aproximações do integral definido procurado que seguidamente se apresentam.

Começemos pelo caso mais simples, o do polinómio de grau $n = 0$ que interpola a função f no ponto x_0 . Então,

$$p_0(x_0) = f(x_0),$$

e portanto,

$$I_h(f) = I(p_0) = \int_a^b f(x_0) dx = (b-a)f(x_0) \quad (28)$$

O valor do integral foi deste modo substituído pelo valor da área de um rectângulo de lado $b-a$ e altura $f(x_0)$. E estas fórmulas de integração são designadas por regras do rectângulo.

Alguns casos particulares das regras do rectângulo

i) Regra do rectângulo à esquerda

$$I_h(f) = \int_a^b f(x_0) dx \approx \int_a^b f(a) dx = (b-a)f(a), \quad (29)$$

se $x_0 = a$, ou seja, se x_0 coincidir com extremo esquerdo do intervalo.

Exemplo 12: Interpretação geométrica

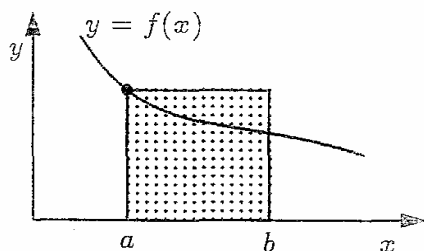


Figura 3: Regra do rectângulo à esquerda (Pina, p. 119)

ii) Regra do rectângulo à direita

$$I_h(f) = \int_a^b f(x_0) dx \approx \int_a^b f(b) dx = (b-a)f(b), \quad (30)$$

se $x_0 = b$, ou seja, se x_0 coincidir com extremo direito do intervalo.

Exemplo 13: Interpretação geométrica

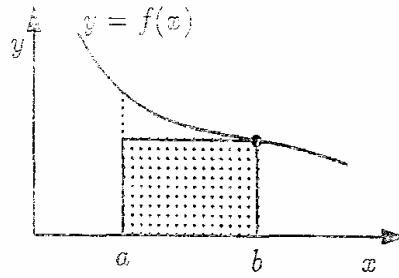


Figura 4: Regra do rectângulo à direita (Pina, p. 119)

Uma vez que esta regra é baseada numa aproximação frágil do integrando, a sua exactidão é baixa.

Se aproximarmos $f(x)$ do seu valor no centro do intervalo chegamos à regra do ponto médio.

(Lins & Wang, p. 132)

2.2.2. Regra do ponto médio

Se aproximarmos $f(x)$ do seu valor no centro do intervalo, ou seja, $x_0 = \frac{a+b}{2}$, à regra conhecida por regra do ponto médio, que é dado pela expressão:

$$I_h(f) = \int_a^b f(x_0) dx = \int_a^b f\left(\frac{a+b}{2}\right) dx = (b-a) f\left(\frac{a+b}{2}\right) \quad (31)$$

Esta regra é de grau **um**. Esta ocorrência serve para alertar de que o grau de exactidão de uma regra de integração não tem de coincidir necessariamente com o grau do polinómio interpolador utilizado na sua construção.

Uma análise à interpretação gráfica destas duas regras simples, rectângulo e ponto médio, **figuras (5) e (6)**, sugere que a regra do ponto médio é superior à regra do rectângulo. (Lins & Wang, p. 132)

Exemplo 14: Interpretação geométrica (Lins & Wang, p.132)

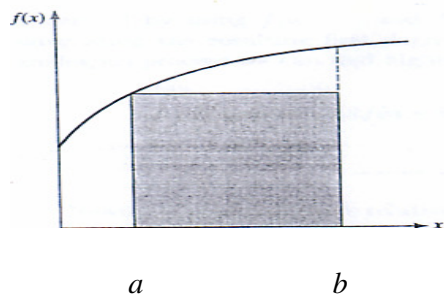


Figura 5: Regra do rectângulo

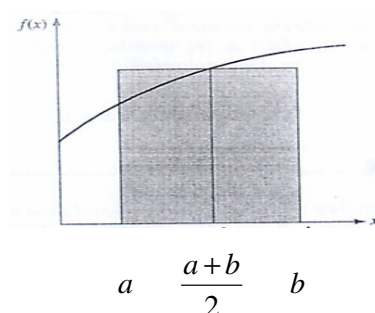


Figura 6: Regra do ponto médio

2.2.3. Regra do trapézio

A regra de trapézio consiste em se aproximar o valor da função contínua de $f(x)$ no intervalo $[a, b]$ por uma função de primeira ordem, isto, geometricamente, é equivalente a aproximar uma curva qualquer por uma recta.

Desta forma, a área sob a função $f(x)$, que é equivalente à integral dessa função, é aproximada pela área do trapézio cuja largura é igual a (a, b) e a altura média igual a $\frac{[f(a) + f(b)]}{2}$.

Nas fórmulas anteriores, as funções integrandas eram aproximadas em cada subintervalo, por polinômios de grau zero.

A chamada regra de trapézio consiste em considerar um polinômio de primeiro grau que aproxima uma função $f(x)$, ou seja, $n = 1$.

Este polinômio terá a forma $y = a_0 + a_1x$ e trata-se da equação que une dois pontos: $a = x_0$ e $b = x_1$.

Se aproximarmos f de uma função linear, interpolando nos pontos a e b . Assim,

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)] \quad (\text{Lins \& Wang, p. 132})$$

O nome regra de trapézio surge porque aproximamos a área debaixo de uma curva de um trapézio.

Exemplo 15: Interpretação geométrica

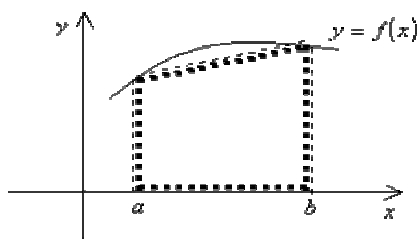


Figura 7: Regra do trapézio

Seja p_1 o polinômio de grau 1 interpolador de f nos nós a e b , isto é, na forma de Newton

$$p_1(x) = f(a) + f[a, b](x - a)$$

e portanto

$$\int_a^b p_1(x)dx = \int_a^b f(a)dx + \int_a^b f[a, b](x - a)dx$$

$$\begin{aligned}
&= f(a)(b-a) + f[a, b] \left[\frac{(x-a)^2}{2} \right]_a^b \\
&= f(a)(b-a) + f[a, b] \frac{(b-a)^2}{2} \\
&= f(a)(b-a) + \frac{f(b) - f(a)}{b-a} \frac{(b-a)^2}{2} \\
&= f(a)(b-a) + \frac{f(b) - f(a)}{2} (b-a) \\
&= (b-a) \left[f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{2} \right] \\
&= (b-a) \left[\frac{2f(a) + f(b) - f(a)}{2} \right] \\
&= \frac{(b-a)}{2} [f(a) + f(b)]
\end{aligned}$$

Obtém-se

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)] \quad (32)$$

Esta fórmula (32) é conhecida por regra do trapézio.

2.2.4. Regra de Simpson

A regra de Simpson consiste na aproximação da função contínua $f(x)$ no intervalo $[a, b]$ por uma função de segunda ordem, ou seja, na aproximação de uma curva por uma parábola.

Ao aproximarmos f de uma interpolação quadrática nos pontos a , c e b , com $c = \frac{a+b}{2}$.

Assim, teremos, $\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right]$. (Lins & Wang, p.133)

Exemplo 16: Interpretação geométrica:

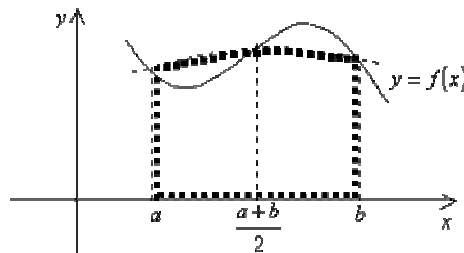


Figura 8: Regra de Simpson

Seja p_2 o polinómio de grau ≤ 2 interpolador de f nos nós a , c e b , com $c = \frac{a+b}{2}$. Tem-se

$$p_2(x) = f(a) + f[a, c](x-a) + f[a, c, b](x-a)(x-c)$$

Efectuando os cálculos necessários, chegamos à expressão

$$\int_a^b p_2(x) dx = \frac{b-a}{6} [f(b) + 4f(c) + f(a)], \quad (33)$$

obtendo-se a designada regra de Simpson:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{6} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right] \quad (34)$$

2.2.5. Regras de Newton – Cotes

Todas as regras apresentadas têm como característica comum a de recorrerem a polinómios interpoladores da função integranda em nós equidistantes no intervalo de integração.

Se continuarmos a determinar polinómios interpoladores de nós equidistantes obteremos a família de regras de Newton-Cotes:

$$I(f) = \int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{d} \sum_{i=0}^n a_i f(x_i) \quad (35)$$

$$\text{Com } x_i = a + ih, \quad i = 0, 1, \dots, n, \quad h = \frac{b-a}{n}$$

Nota: Os coeficientes a_i são simétricos ($a_{n-i} = a_i$).

A tabela seguinte reúne algumas destas regras

Regra	n	d	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	(...)
Trapézio	1	2	1					
Simpson	2	6	1	4				
Três Oitavos	3	8	1	3				
Boole	4	90	7	32	12			
—	5	288	19	75	50			
—	6	840	41	216	27	272		
—	7	17280	751	3577	1323	2989		
—	8	28350	989	5888	-928	10496	-4540	
(:)								

Tabela 3: Fórmulas de Newton-Cotes

Exemplo 17: Qual é a fórmula de Newton-Cotes, quando se interpola com um polinómio de grau 2?

RESOLUÇÃO

Da linha $n = 2$, da tira-se que: $n = 2$, $d = 6$, $a_0 = 1$, $a_1 = 4$, $a_2 = a_0 = 1$

Vem que, $I(f) \approx \frac{b-a}{d} \left(\sum_{i=0}^2 a_i f(x_i) \right)$

Logo, $I(f) \approx \frac{b-a}{d} (a_0 f(x_0) + a_1 f(x_1) + a_2 f(x_2))$

$\approx \frac{b-a}{6} (f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2))$, Obtém-se a regra conhecida por **regra de Simpson**.

2.2.6. Erros de Integração

Para poder escolher qual a regra de integração a utilizar num dado caso concreto é conveniente dispor de estimativas do erro cometido que possam orientar essa escolha.

Teorema 2.1:

Seja $f \in C^2([a, b])$. Então

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)] - \frac{(b-a)^3}{12} f''(\eta), \eta \in (a, b) \quad (36)$$

Demonstração:

Recorde-se que se p_n é o polinómio interpolador de grau $\leq n$ que interpola $f \in C^{n+1}[a, b]$ nos nós distintos x_0, x_1, \dots, x_n do intervalo $[a, b]$, então

$$e_n(x) = f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} (x-x_0)(x-x_1) \cdots (x-x_n) \quad (37)$$

onde $\xi(x) \in [a, b]$.

Se p_n representa o polinómio de grau 1 interpolador de f em a e b , obtém-se

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \int_a^b p_1(x) dx + \int_a^b \frac{f''(\xi(x))}{2!} (x-a)(x-b) dx \\ &= \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)] + E_T, \end{aligned}$$

onde E_T designa o erro de integração na regra do trapézio.

Então, necessitamos de demonstrar que

$$E_T = \int_a^b \frac{f''(\xi(x))}{2!} (x-a)(x-b) dx = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\eta), \eta \in (a, b).$$

Recorde-se o **Teorema do Valor Médio Pesado para Integrais**:

“Se $f \in C[a, b]$, g é integrável em $[a, b]$ e $g(x)$ não muda de sinal em $[a, b]$, então existe um número c , $a < c < b$, tal que:

$$\int_a^b f(x) \cdot g(x) dx = f(c) \int_a^b g(x) dx.”$$

Como $(x-a)(x-b)$ não muda de sinal em $[a, b]$ e f'' é contínua.

$$E_T = f''(\eta) \int_a^b \frac{(x-a)(x-b)}{2} dx, \eta \in (a, b).$$

Sabendo que

$$\int_a^b \frac{(x-a)(x-b)}{2} dx = -\frac{(b-a)^3}{12},$$

fica provado o resultado pretendido, isto é,

$$E_T = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\eta), \eta \in (a, b). \quad (38)$$

Teorema 2.2:

Seja $f \in C^4[a, b]$. Então

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{6} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right] - \frac{1}{90} \left(\frac{b-a}{2}\right)^5 f^{(4)}(\eta), \eta \in (a, b). \quad (39)$$

Donde se conclui que designando E_S o erro de integração na regra de Simpson, temos

$$E_S = -\frac{1}{90} \left(\frac{b-a}{2}\right)^5 f^{(4)}(\eta), \eta \in (a, b). \quad (40)$$

Exemplo 18: Determina uma aproximação para $\int_0^1 e^{-x^2} dx$ usando a regra de Simpson.

RESOLUÇÃO

De acordo com (34).

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx \approx \frac{1-0}{6} \left[e^{-0^2} + 4e^{-(0.5)^2} + e^{-1^2} \right] \approx 0.75$$

Se pretendêssemos calcular um limite superior para o valor absoluto do erro na aproximação obtida, de acordo com (40), é

$$E_s = -\frac{1}{90} \left(\frac{1-0}{2} \right)^5 f^{(4)}(\eta), \quad \eta \in (0,1),$$

com $f(x) = e^{-x^2}$. Donde

$$|E_s| \leq \frac{1}{2880} M,$$

sendo $M = \max_{x \in [0,1]} |f^{(4)}(x)|$.

Mas,

$$f'(x) = -2xe^{-x^2}$$



$$f''(x) = (-2 + 4x^2)e^{-x^2}$$

$$f'''(x) = (12x - 8x^3)e^{-x^2}$$

$$f^{(4)}(x) = (12 - 48x^2 + 16x^4)e^{-x^2}$$

$$f^{(5)}(x) = 8x(-15 + 20x^2 - 4x^4)e^{-x^2}$$

$$f^{(5)}(x) = 0 \Leftrightarrow x = 0 \vee x \approx 2.02 \vee x \approx -2.02 \vee x \approx 0.96 \vee x \approx -0.96$$

	0	0.96	1
$f^{(5)}(x)$		-	+
$f^{(4)}(x)$			
		m	

Verifica-se que

$$|f^{(4)}(0)| = 12$$

$$|f^{(4)}(0.96)| = 7.42$$

$$|f^{(4)}(1)| = 7.35$$

$$\therefore \max_{x \in [0,1]} |f^{(4)}(x)| = 12.$$

$$\text{Donde } |E_s| \leq \frac{12}{2880} \leq (0.42)10^{-2}$$

Erro de integração cometido na regra de rectângulo e do ponto médio

Para as regras do rectângulo temos que $n=0$ com $w_0(x) = x-a$ para a regra do rectângulo à esquerda, e $w_0(x) = x-b$ para a regra do rectângulo à direita. Em ambos os casos w_0 não muda de sinal em $[a, b]$, pelo que podemos aplicar a expressão (37), assim o erro cometido para a **regra do rectângulo à esquerda** é

$$E_h(f) = f'(\xi) \int_a^b (x-a) dx = \frac{1}{2} f'(\xi) (b-a)^2. \quad (41)$$

Para a **regra do rectângulo à direita** é

$$E_h(f) = f'(\xi) \int_a^b (x-b) dx = -\frac{1}{2} f'(\xi) (b-a)^2 \quad (42)$$

No caso de aplicarmos a regra do ponto médio e admitirmos que f é de classe C^2 em $[a, b]$, o respectivo majorante do erro de integração pode ser calculado com a seguinte expressão:

$$E_h(f) = \frac{1}{24} f''(\xi) (b-a)^3. \quad (43)$$

2.3. Regras de Gauss

2.3.1. Deduções das fórmulas

A construção das regras de integração de Newton-Cotes envolvia as seguintes fases:

- Fixação do número e localização dos nós;
- Determinação do polinómio interpolador p_n e cálculo dos pesos.

Por exemplo, na regra de Simpson o polinómio interpolador tem grau 2, logo a integral será exacta para polinómio de grau 2.

Foi possível deste modo obter regras cujo grau de exactidão era $d = n$ ou $d = n + 1$.

No entanto, existe a possibilidade de conseguir graus de exactidão $d = 2n + 1$ com fórmulas de $n + 1$ nós.

O objectivo desta secção é o de mostrar como é que tais regras podem ser construídas. Para isso, procuraremos deduzir fórmulas do tipo

$$I_h(f) = \sum_{i=1}^n A_i f(x_i) \quad (44)$$

que possuam o maior grau possível. Os pontos x_i são designados pontos de integração e os pontos A_i designados pesos da quadratura ou simplesmente coeficientes.

Para tal, a localização dos nós não deve ser fixada a priori.

NOTA 2: Nesta secção os pontos de integração serão x_1, \dots, x_n e não x_0, x_1, \dots, x_n , como nas secções anteriores.

Exemplo 19: Determinar a regra de maior grau de exactidão com 2 pontos de integração para o intervalo $[-1, 1]$.

RESOLUÇÃO

Sejam x_1, x_2 os pontos de integração e A_1 e A_2 os respectivos pesos.

Dizer que a fórmula é exacta para polinómios de grau ≤ 3 , equivale dizer que a fórmula é exacta para: $f(x) = 1$; $f(x) = x$; $f(x) = x^2$; $f(x) = x^3$

Daí, obtemos o seguinte sistema não linear, com 4 equações e 4 incógnitas:

$$I(1) = \int_{-1}^1 1 dx = [x]_{-1}^1 = 1 - (-1) = 2 = I_h(1) = A_1 + A_2 \quad (\text{I})$$

$$I(x) = \int_{-1}^1 x dx = \left[\frac{x^2}{2} \right]_{-1}^1 = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0 = I_h(x) = A_1 x_1 + A_2 x_2 \quad (\text{II})$$

$$I(x^2) = \int_{-1}^1 x^2 dx = \left[\frac{x^3}{3} \right]_{-1}^1 = \frac{1}{3} - \left(-\frac{1}{3} \right) = \frac{2}{3} = I_h(x^2) = A_1 x_1^2 + A_2 x_2^2 \quad (\text{III})$$

$$I(x^3) = \int_{-1}^1 x^3 dx = \left[\frac{x^4}{4} \right]_{-1}^1 = \frac{1}{4} - \frac{1}{4} = 0 = I_h(x^3) = A_1 x_1^3 + A_2 x_2^3 \quad (\text{IV})$$

Ou seja,

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = 2 \\ A_0 x_0 + A_1 x_1 = 0 \\ A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2 = \frac{2}{3} \\ A_0 x_0^3 + A_1 x_1^3 = 0 \end{cases} \quad (\#)$$

Uma vez que existe uma simetria das equações, escrevemos por hipótese: $x_2 = -x_1$

Então,

$$(II) \Rightarrow A_1 = A_2;$$

$$(I) \Rightarrow A_1 = A_2 = 1$$

$$(III) \Rightarrow x_1^2 + (-x_1)^2 = \frac{2}{3} \Leftrightarrow 2x_1^2 = \frac{2}{3} \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow 6x_1^2 - 2 = 0 \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow x_1^2 = \frac{1}{3} \Leftrightarrow x_1 = \pm \sqrt{\frac{1}{3}} \Leftrightarrow x_1 = \pm \frac{\sqrt{3}}{3}$$

$$(IV) \Rightarrow x_1^3 - x_1^3 = 0 \text{ é identicamente satisfeita.}$$

Resolvendo o sistema (#), obteremos $x_1 = -\frac{\sqrt{3}}{3}$; $x_2 = \frac{\sqrt{3}}{3}$; $A_1 = 1 = A_2$

A regra escreve-se, assim

$I_h(f) = f\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + f\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)$, tendo grau de exactidão **3**, a máxima possível com **2** pontos de integração.

Chegamos assim ao resultado interessante que mostra que a adição do valor da função nos pontos $x_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}}$ e $x_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}$ produz uma estimativa do integral cuja ordem de exactidão é de três (terceira ordem).

Se $f \in C^4[-1,1]$, o erro de truncatura da fórmula de Gauss de dois pontos é dado por

$$E_2 = \frac{f^{(4)}(\eta)}{135}, \quad \eta \in (-1,1).$$

Não iremos apresentar a dedução no caso de $n = 2,3,4,\dots$, mas é útil saber usar tais fórmulas.

Na **Tabela 3**, indicamos os pesos e os nós nas fórmulas de Gauss.

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \sum_{i=0}^n A_i f(x_i)$$

Nº de pontos	A_i (pesos)	x_i (nós)
2	$A_0 = 1.0$ $A_1 = 1.0$	$x_0 = -0.577350269$ $x_1 = 0.577350269$
3	$A_0 = 0.555555556$ $A_1 = 0.888888889$ $A_2 = 0.555555556$	$x_0 = -0.774596669$ $x_1 = 0.0$ $x_2 = 0.774596669$
4	$A_0 = 0.347854845$ $A_1 = 0.652145155$ $A_2 = 0.652145155$ $A_3 = 0.347854845$	$x_0 = -0.861136312$ $x_1 = -0.339981044$ $x_2 = 0.339981044$ $x_3 = 0.861136312$
(:)

Tabela 4: Fórmulas de Gauss ou Gauss-Legendre com $(n + 1)$ pontos

2.3.2. Erros de Integração

Consideremos o polinómio interpolador de Hermite H_n que satisfaz as seguintes condições:

$$\left. \begin{array}{l} H_n(x_i) = f(x_i) \\ H'_n(x_i) = f'(x_i) \end{array} \right\} i = 1, \dots, n.$$

O erro de interpolação com este polinómio (polinómio de Hermite) é dado por:

$$e_h(x) = f(x) - H_n(x) = f[x_1, x_1, \dots, x_n, x_n, x] (\Psi_n(x))^2.$$

Com a regra de Gauss com n nós $I_h(f) = I(H_n)$ e o erro de integração é, portanto, dado por:

$$E_h(f) = I(f) - I_h(f) = \int_a^b f[x_1, x_1, \dots, x_n, x_n, x] (\Psi_n(x))^2 dx.$$

Uma vez que $(\Psi_n(x))^2 \geq 0$, podemos aplicar o teorema do valor médio, teremos que:

$$E_h(f) = f[x_1, x_1, \dots, x_n, x_n, \xi] \int_a^b (\Psi_n(x))^2 dx.$$

Relacionando diferenças divididas com derivadas, de acordo com o teorema 2.3.4 (**Pina, p.52**), chegamos à seguinte igualdade para o erro das regras de Gauss

$$E_h(f) = c_n (b-a)^{2n+1} f^{(2n)}(\xi) \quad (###)$$

$$\text{Com } c_n = \frac{\int_a^b (\Psi_n(x))^2 dx}{[(b-a)^{2n+1} (2n)!]} \text{ e } \xi \in [a, b]. \quad (#####)$$

A expressão (###) confirma o facto já conhecido de que as regras de Gauss com n pontos possuem um grau de exactidão igual $2n-1$. Estas são, pois, as regras que possuem maior grau de exactidão para um dado número de pontos de integração e tenderão por isso a ser as mais económicas do ponto de vista computacional.

O seu emprego foi inicialmente travado pelo facto de os nós de integração e os pesos serem números irracionais, pouco atraentes quando os cálculos eram feitos manualmente. (Pina, 1995, p. 129 a 130)

2.4. Regras compostas

As aproximações obtidas pelas regras de Newton-Cotes não têm, muitas vezes, a precisão desejada. O uso de fórmulas deduzidas aproximando a função integrando por polinómios interpoladores de grau superior, pode não produzir melhores resultados.

Uma maneira de obter aproximações com menor erro consiste em subdividir o intervalo de integração e aplicar as regras mais simples nesses subintervalos. Com efeito, reparando nas expressões do erro das várias fórmulas, todas elas mostram que aquele depende de uma certa potência do comprimento $(b-a)$ do intervalo de integração $[a, b]$. Então, se reduzirmos este intervalo, o erro virá grosso modo reduzido na proporção dessa potência.

Tendo em vista a diminuir o erro cometido na aplicação das regras anteriores, o intervalo de integração pode ser subdividido em diferentes subintervalos, habitualmente de idêntico comprimento, de forma a repetidamente se aplicarem os algoritmos de integração.

A exploração desta ideia conduz às regras compostas que consistem basicamente em subdividir o intervalo $\bar{\Omega}$ em n subintervalos $\bar{\Omega}_i = [a_{i-1}, a_i]$ com $i = 1, \dots, n$, $a_0 = a$, $a_n = b$ e aplicar em cada um destes subintervalos uma das regras de integração deduzidas anteriormente, ou seja, partir da propriedade de integral

$$I(f; \bar{\Omega}) = \int_a^b f(x) dx = \sum_{i=1}^n \int_{a_{i-1}}^{a_i} f(x) dx = \sum_{i=1}^n I(f; \bar{\Omega}_i)$$

e calcular cada um dos n integrais do segundo membro por integração numérica.

2.4.1. Regra do rectângulo à esquerda composta

A fórmula da regra do rectângulo à esquerda composta é dada pela expressão:

$$I_h(f; \bar{\Omega}) = \sum_{i=1}^n I_h(f; \bar{\Omega}_i) = \sum_{i=1}^n hf(a_{i-1}) = h \sum_{i=1}^n f(a_{i-1}) \quad (45)$$

O erro cometido é a soma dos erros cometidos em cada subintervalo, tendo em conta a expressão (41), temos que

$$E_h(f; \bar{\Omega}) = \sum_{i=1}^n E_h(f; \bar{\Omega}_i) = \sum_{i=1}^n \frac{1}{2} f'(\xi_i) h^2 = \frac{h^2}{2} \sum_{i=1}^n f'(\xi_i) \quad (46)$$

Se $f \in C^1(\bar{\Omega})$ e aplicando o teorema do valor médio para somatórios de valores duma função, podemos escrever que:

$$\sum_{i=1}^n f'(\xi_i) = nf'(\xi) = f'(\xi) \frac{b-a}{h}, \quad \xi \in \bar{\Omega}$$

logo a expressão (46) se reduz à

$$E_h(f) = \frac{b-a}{2} f'(\xi) h \quad (47)$$

Esta expressão (47) é designada por erro cometido na regra do rectângulo à esquerda composta.

2.4.2. Regra do rectângulo à direita composta

Aplicando um raciocínio análogo obtemos a expressão para a regra do rectângulo à direita composta e a fórmula do erro cometido por esta regra, que são dadas pelas expressões:

$$I_h(f) = \sum_{i=1}^n hf(a_i) = h \sum_{i=1}^n f(a_i) \quad (48)$$

$$E_h(f) = -\frac{b-a}{2} f'(\xi) h \quad (49)$$

A expressão (48) é a regra do rectângulo composta à direita e a expressão (49) é o erro cometido.

2.4.3. Regra do ponto médio composta

A regra do ponto médio composta também não oferece dificuldade, pelo que nos limitamos a apresentar as fórmulas finais,

$$I_h(f) = h \sum_{i=1}^n f\left(a_{i-1} + \frac{h}{2}\right) \quad (50)$$

Teorema 2.3: Se f é de classe C^2 em $[a, b]$, então o erro cometido é dado pela expressão:

$$E_h(f) = \frac{b-a}{24} f''(\xi) h^2 \quad (51)$$

2.4.4. Regra do trapézio composta

Como é claro, se usássemos a regra dos trapézios simples para calcular o integral num intervalo $[a, b]$, íamos obter uma aproximação grosseira do valor do integral, por isso, interessa-nos decompor esse intervalo em subintervalos cada vez mais pequenos, e nesses subintervalos aplicamos a regra dos trapézios simples. Trata-se, neste caso, de fazer uma aproximação, da função integrando, usando um spline linear.

Exemplo 20: Interpretação geométrica

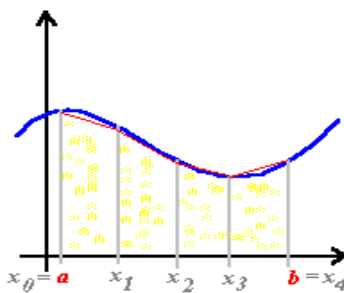


Figura 9: Regra do trapézio composta

Para simplificar, consideramos que o tamanho desses sub-intervalos é constante h .

Assim, definimos $h = \frac{b-a}{n}$, onde n é o número de subintervalos, de igual amplitude, com os

pontos $x_0 = a, x_1, \dots, x_i, \dots, x_n = b$, sendo $x_i = a + ih$ ($i = 0, 1, \dots, n$), portanto, o valor do integral é igual à soma dos integrais nos sub-intervalos.

Então,
$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=1}^n \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx$$

logo, aplicando a regra dos trapézios simples a cada um desses sub-intervalos, obtemos

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx \approx \frac{h}{2} [f(x_{i-1}) + f(x_i)], \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

e denotando $f(x_i) \equiv f_i$, obtém-se a regra do trapézio composta,

$$\int_a^b f(x) dx \approx \underbrace{\frac{h}{2} [f_0 + 2f_1 + 2f_2 + \dots + 2f_{n-2} + 2f_{n-1} + f_n]}_{I_T(h)} \quad (52)$$

Teorema 2.4:

Seja $f \in C^2[a, b]$ e $x_i = a + ih$ ($i = 0, 1, \dots, n$) com $h = \frac{b-a}{n}$. Então

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{2} [f_0 + 2f_1 + \dots + 2f_{n-1} + f_n] - \frac{h^2}{12} (b-a) f''(\eta), \eta \in (a, b) \quad (53)$$

Demonstração:

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=1}^n \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx$$

Pelo **Teorema 2.1.**,

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \sum_{i=1}^n \left[\frac{h}{2} (f_{i-1} + f_i) - \frac{h^3}{12} f''(\eta_i) \right], \quad \eta_i \in (x_{i-1}, x_i) \\ &= \frac{h}{2} [f_0 + 2f_1 + \dots + 2f_{n-1} + f_n] - \sum_{i=1}^n \frac{h^3}{12} f''(\eta_i) \end{aligned}$$

Fazendo

$$E_T(h) = - \sum_{i=1}^n \frac{h^3}{12} f''(\eta_i) = - \frac{h^3}{12} \sum_{i=1}^n f''(\eta_i),$$

atendendo ao teorema do valor médio para as somas finitas de valores de uma função,

$$\begin{aligned} E_T(h) &= - \frac{h^3}{12} f''(\eta) \sum_{i=1}^n 1, \quad \eta \in (a, b) \\ &= - \frac{h^3}{12} f''(\eta) n = - \frac{h^3}{12} f''(\eta) \frac{(b-a)}{h} = - \frac{h^2}{12} (b-a) f''(\eta), \quad \eta \in (a, b). \end{aligned}$$

Podemos pois concluir que o erro de truncatura na regra do trapézio composta é dado por

$$E_T(h) = -\frac{h^2}{12}(b-a)f''(\eta), \eta \in (a,b) \quad (54)$$

Nota 2: Constatamos que, obtendo o erro da regra dos trapézios simples, o erro da regra dos trapézios composta será a soma dos erros cometido em cada subintervalo.

2.4.5. Regra de Simpson Composta

Exemplo 21: Interpretação geométrica

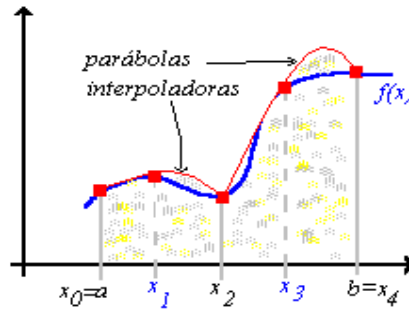


Figura 10: Regra de Simpson Composta

Convém referir que, enquanto a Regra dos Trapézios composta corresponde a fazer a aproximação da função integrando através de um *spline linear*, no caso da Regra de Simpson composta, a aproximação feita não corresponde a um *spline* de grau 2, pois não exigimos regularidade da derivada nos nós. Essa regularidade não é necessária quando integramos. Aliás, geometricamente depreende-se que, exigir a regularidade da função aproximadora, nos nós, não traz aparentes vantagens para a aproximação da área delimitada pelo gráfico da função.

Defina-se a partição de $[a,b]$ num número par de subintervalos de igual amplitude $[x_{i-1}, x_i]$ ($i=1,2,\dots,n$), sendo $x_i = a + ih$ e $h = \frac{b-a}{n}$.

Aplicando a regra de Simpson (simples) em cada “duplo intervalo”

$$\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x) dx \approx \frac{2h}{6} [f_{i-1} + 4f_i + f_{i+1}] , (i=1,3,5,\dots,n-1)$$

obtém-se a regra de Simpson composta,

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{3} \underbrace{[f_0 + 4f_1 + 2f_2 + \dots + 2f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n]}_{I_s(h)} \quad (55)$$

Aplicando todos os cálculos, facilmente se deduz que o erro de truncatura na regra de Simpson composta é

$$E_S(h) = -\frac{h^4}{180}(b-a)f^{(4)}(\eta), \eta \in (a,b) \quad (56)$$

isto é,

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{3}[f_0 + 4f_1 + 2f_2 + \dots + 2f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n] - \frac{h^4}{180}(b-a)f^{(4)}(\eta), \eta \in (a,b) \quad (57)$$

Nota 3: Tal como no caso da Regra dos Trapézios composta, o erro da Regra de Simpson composta, resulta da soma dos erros em cada subintervalos.

2.4.6. Regra do trapézio corrigida Composta

Todas as regras de integração deduzidas até aqui foram construídas recorrendo a polinómios interpoladores da função integrando. Porém nada impede o emprego de polinómios que interpolam também as derivadas da integrando.

Para exemplificar, consideremos $H_3(x)$ o polinómio cúbico de Hermite interpolador de f e f' em a e b , isto é, na forma de Newton, com $h = b - a$:

$$H_3(x) = f(a) + f[a,a](x-a) + f[a,a,b](x-a)^2 + f[a,a,b,b](x-a)^2(x-b)$$

onde

$$f[a,a] = f'(a)$$

$$\begin{aligned} f[a,a,b] &= \frac{f[a,b] - f[a,a]}{h} \\ &= \frac{1}{h} \left\{ \frac{1}{h} [f(b) - f(a)] - f'(a) \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
f[a, a, b, b] &= \frac{f[a, b, b] - f[a, a, b]}{h} = \\
&= \frac{f[a, b, b] - \frac{1}{h} \left\{ \frac{f(b) - f(a)}{h} - f'(a) \right\}}{h} \\
&= \frac{\frac{f[b, b] - f[a, b]}{h} - \frac{1}{h} \left[\frac{f(b) - f(a)}{h} - f'(a) \right]}{h} \\
&= \frac{\frac{1}{h} \left[f'(b) - \frac{f(b) - f(a)}{h} \right] - \frac{1}{h} \left[\frac{f(b) - f(a)}{h} - f'(a) \right]}{h} \\
&= \frac{1}{h^2} \left\{ f'(b) + f'(a) - \frac{2}{h} [f(b) - f(a)] \right\}.
\end{aligned}$$

Por outro lado, vimos anteriormente que o erro da interpolação de Hermite é dado por:

$$e_3(x) = f(x) - H_3(x) = \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!} (x-a)^2 (x-b)^2, \xi \in (a, b).$$

Então teremos

$$\int_a^b f(x) dx = \int_a^b H_3(x) dx + \int_a^b e_3(x) dx$$

Mas,

$$\begin{aligned}
\int_a^b H_3(x) dx &= hf(a) + \frac{h^2}{2} f[a, a] + \frac{h^3}{3} f[a, a, b] - \frac{h^4}{12} f[a, a, b, b] \\
&= hf(a) + \frac{h^2}{2} f'(a) + \frac{h^2}{3} \left\{ \frac{1}{h} [f(b) - f(a)] - f'(a) \right\} - \\
&\quad - \frac{h^2}{12} \left\{ f'(a) + f'(b) - \frac{2}{h} [f(b) - f(a)] \right\} \\
&= \frac{h}{2} [f(a) + f(b)] + \frac{h^2}{12} [f'(a) - f'(b)].
\end{aligned}$$

Repare-se que

- $\frac{h}{2} [f(a) + f(b)]$, corresponde à integração utilizando a regra do trapézio.
- $\frac{h^2}{12} [f'(a) - f'(b)]$, pode ser encarada como uma correcção a introduzir.

$$\text{Em conclusão:} \quad \int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{2} [f(a) + f(b)] + \frac{h^2}{12} [f'(a) - f'(b)]. \quad (58)$$

Esta regra é conhecida como regra do trapézio corrigida.

Relativamente ao erro cometido,

$$\int_a^b e_3(x)dx = \frac{1}{4!} \int_a^b (x-a)^2 (x-b)^2 f^{(4)}(\xi)dx,$$

recorrendo ao Teorema do Valor Médio Pesado para Integrais,

$$\begin{aligned} \int_a^b e_3(x)dx &= \frac{1}{4!} f^{(4)}(\eta) \int_a^b (x-a)^2 (x-b)^2 dx, \eta \in (a,b) \\ &= \frac{h^5}{720} f^{(4)}(\eta), \eta \in (a,b). \end{aligned} \quad (59)$$

Podemos pois finalmente escrever

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)] + \frac{(b-a)^2}{12} [f'(a) - f'(b)] + \frac{(b-a)^5}{720} f^{(4)}(\eta), \eta \in (a,b). \quad (60)$$

É também possível a obtenção da fórmula do trapézio corrigida composta. Considere-se $f \in C^4[a,b]$. Defina-se a partição de $[a,b]$ em n subintervalos de igual amplitude com os pontos $x_i = a + ih$ ($i = 0, 1, \dots, n$) e $h = \frac{b-a}{n}$. Então

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= \sum_{i=1}^n \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx = \\ &= \sum_{i=1}^n \left\{ \frac{h}{2} [f(x_{i-1}) + f(x_i)] + \frac{h^2}{12} [f'(x_{i-1}) - f'(x_i)] \right\} + \frac{h^5}{720} \sum_{i=1}^n f^{(4)}(\eta_i), \eta_i \in (x_{i-1}, x_i) \\ &= \frac{h}{2} [f_0 + 2(f_1 + \dots + f_{n-1}) + f_n] + \frac{h^2}{12} [f'_0 - f'_n] + \frac{h^4}{720} (b-a) f^{(4)}(\eta), \eta \in (a,b). \end{aligned} \quad (61)$$

Donde se conclui que

$$I_{TC}(h) = \frac{h}{2} [f_0 + 2(f_1 + \dots + f_{n-1}) + f_n] + \frac{h^2}{12} (f'_0 - f'_n) \quad (62)$$

constitui a regra do trapézio corrigida composta. O erro cometido é dado por

$$E_{TC}(h) = \frac{h^4}{720} (b-a) f^{(4)}(\eta), \eta \in (a,b). \quad (63)$$

No Maple pode-se também implementar rotinas que nos permite determinar numericamente uma aproximação para a integração numérica, utilizando a Regra de Trapézio e a Regra de Simpson. (a implementação encontra-se no anexo)

CONCLUSÃO

É sempre agradável chegar ao fim de um trabalho e ter a sensação de que a missão foi cumprida, ou seja os objectivos preconizados foram atingidos.

O trabalho científico ora findo é fruto de uma pesquisa bibliográfica cuidada, orientada e apresentado um estudo, ainda que incompleto, sobre a *Interpolação polinomial e Integração numérica e Aplicação com Maple 7*.

A sua realização constituiu um momento importante de experiência positiva, pois que adquiri muitos conhecimentos, não só sobre o tema em estudo bem como sobre temas relacionados com o mesmo e em particular sobre a Análise Numérica Computacional.

Dos dois métodos de interpolação polinomial (método de Lagrange e de Newton), utilizados na determinação do polinómio interpolador permitem-me concluir que o método de Newton é o mais eficaz, pois, como é de salientar, os polinómios estão associados a um conjunto de nós e uma mudança de posição ou do número de nós não altera estes polinómios e isto, não acontece com o método de Lagrange ou seja altera completamente os polinómios.

Na determinação do polinómio interpolador deparei com algumas dificuldades, principalmente quanto à determinação do polinómio usando funções splines com destaque as splines cúbicas, devido a sua construção trabalhosa. Mas apesar disso, a spline cúbica é a mais usada, pois tem a primeira e segunda derivadas contínuas.

Uma outra dificuldade foi a implementação do programa no Maple. É claro que o uso de programas como o Maple e outros sistemas de computação algébrica exigem treinamento dos

usuários, pois estes sistemas geralmente são concebidos de resolver desde os problemas mais elementares de Matemática até os mais avançados.

As diferentes técnicas de integração numérica discutidas aqui podem ser utilizadas para o cálculo de integrais definidas. As fórmulas dos trapézios e de Simpson são mais práticas, pois os pontos são uniformemente distribuídos, obtidos a partir dos dados da integral. Nas aplicações onde os valores de uma função são obtidos experimentalmente (por exemplo, o volume de terra a ser extraído na construção de um túnel), estas fórmulas são bastante úteis. Por outro lado, em problemas onde se procura um resultado mais acurado, com menor esforço computacional, a quadratura gaussiana (ou regra de Gauss) é bastante vantajosa, pois exige o cálculo da função em um menor número de pontos. De modo geral, o esforço computacional para implementar a quadratura gaussiana é a metade do esforço correspondente à fórmula de Simpson, para obter um resultado com erros equivalentes. Da mesma forma, a fórmula de Simpson requer a metade do esforço da regra do trapézio, para obter um resultado equivalente.

O uso do Maple permitiu que os cálculos, bastante complexos pela natureza da função envolvida, fossem efectuados de modo simples, bastando para isto, saber definir a função na linguagem do programa e criar as variáveis necessárias para armazenar os resultados intermediários, o que exige um certo conhecimento de vectores. Deste modo, conteúdos considerados mais avançados podem vir a ser abordados, pois o tempo usado em cálculos numéricos com máquinas lentas e com poucos recursos pode ser substituído pelo estudo de problemas mais complexos, deixando os cálculos a cargo do computador.

A integração numérica é um caso típico de problema que hoje pode ser mais explorado pelos professores de Cálculo Numérico, pois com o uso de recursos computacionais mais sofisticados as quadraturas gaussianas podem ser usadas mais cedo na graduação, possibilitando aos estudantes um contacto com uma técnica mais eficiente de integração.

A realização deste trabalho foi feita com resultados positivos graças a pesquisa bibliográfica e do recurso à Internet. Espero ter dado contribuição para a disciplina de Análise Numérica Computacional leccionada no curso de Licenciatura em Matemática, e de ter reunido e seleccionado ferramentas necessárias para ajudar todos os que se interessarem por esta área da Matemática; a compreender melhor o tema (Interpolação Polinomial e Integração Numérica).

BIBLIOGRAFIA

LEMOS, Carlos e PINA, Heitor. **Métodos Numéricos _ Complementos e guia prático.** IST press.

LINS, Peter e WANG, Richard L. C.. **Numerical Methods_ In Introduction to Scientific Computing using Matlab.** Jones and Bartlett Mathematics. Exploring.

PINA , Heitor. **Métodos Numéricos.** Mc Graw-Hill. Lisboa. 1995.

RODRIGUES, José Alberto. **Métodos Numéricos _ Introdução, Aplicação e Programação.** Lisboa. Edições Sílabo. 2003.

ROSA, Mário da Silva. **Iópicos de Análise Numérica.** Aveiro. 1993/94.

RUGGIERO, Márcia A. Gomes e LOPES, Vera Lúcia. **Cálculo Numérico. Aspectos Teóricos e Computacionais.** São Paulo. Mc Graw-Hill. 2000.

SILVA, Gilson Inácio D. S.. **Aplicações do Maple na Disciplina de Análise Numérica Computacional.** Trabalho Monográfico. Praia: Instituto Superior de Educação, Departamento de C&T. 2008.

SITES CONSULTADOS

<<http://www.math.ist.utl.pt/~calves/courses/integral/>>. Consultado em: 25 de Abril 2009.

<http://www.Itoldi.est.ips.pt/metnum/documentos/MN_CHEDAS_SAMPAIO/IntNum.pdf>

Consultado em: 3 de Maio 2009

<<http://www.alunos.eel.usp.br/numerico/notasDeaula/integracao.pdf>>. Consultado em: 16 de Maio 2009.

<http://www.fc.unesp.br/~arbalho/Iniciacao_Cientifica/interpolacao/teoria/3_Splines.pdf>

Consultado em: 9 de Junho 2009.

<<http://www.math.ist.utl.pt/~calves/cursos/Interpola.HTM>>. Consultado em: 25 de Abril 2009.

<http://www.Itoldi.est.ips.pt/metnum/documentos/MN_CHEDAS_SAMPAIO/IntPol.pdf>.

Consultado em: 27 de Abril 2009.

PORTUGAL, Renato. **Introdução ao Maple**. Rio de Janeiro. 2002. Disponível em:

<www.lncc.br/~portugal/curso.pdf>. Consultado em: 12 de Julho 2009.

ANEXOS

APLICAÇÃO DO SOFTWARE MAPLE 7 NA RESOLUÇÃO DE EXERCÍCIOS E PROBLEMAS PARA A OBTENÇÃO DO POLINÓMIO INTERPOLADOR E DETERMINAÇÃO APROXIMADA DE UMA INTEGRAÇÃO NUMÉRICA

INTERPOLAÇÃO POLINOMIAL

No Maple pode-se implementar rotina que permite determinar o polinómio interpolador através dos polinómios de **Lagrange**, fórmula de **Newton** e **funções splines**.

FÓRMULA DE LAGRANGE

O procedimento para determina o polinómio interpolador p , pela fórmula de Lagrange tem a seguinte sintaxe: **lagrangepol:=proc()** .

#POLINÓMIOS DE LAGRANGE E POLINÓMIO INTERPOLADOR

```
> restart;
> lagrangepol:=proc()
> local vind::list, vdep::list, k::integer, j::integer,
n::integer, f::polynom, l::polynom;
> global p;
> print(`Introduza o número de nós a serem utilizados`);
> n:=readstat(); print(`Introduza os nós`);
> vind:=readstat();
> print(`Introduza os valores nodais`);
> vdep:=readstat();
> f:=0;
> for k from 1 to n do
> l[k]:=1;
> for j from 1 to n do
>     if k=j then next;
>     else l[k]:=l[k]*(x-vind[j])/(vind[k]-vind[j]);
>     fi;
> od;
> print(`O polinómio de Lagrange`, L[k], `é`, expand(l[k],x));
> f:=f+l[k]*vdep[k];
> od;
> print(`O polinómio interpolador é p(x)=`, expand(f));
> expand(f);
> p:=unapply(%,x):#Transformação do pol interpolador em função
> end;
```

FÓRMULA DE NEWTON

O procedimento para determina o polinómio interpolador p , pela fórmula de Lagrange tem a seguinte sintaxe: `newtonpol:=proc()`.

INTERPOLAÇÃO POR FÓRMULA DE NEWTON (DIFERENÇAS DIVIDIDAS)

```
> restart;
> newtonpol:=proc()
> local xx::list, yy::list,
n::integer,pl::polynom,M::matrix,i::integer, j::integer,
k::integer,t::integer,f::polynom;
> global p;
> print(`Quantos nós serão utilizados?`);
> n:=readstat();
> print(`Introduza o valor de cada um dos nós`);
> xx:=readstat();
> print(`Introduza os valores nodais`);
> yy:=readstat();
> M:=Matrix(n,n+1);          #construção da tabela de diferenças
divididas
> for k from 1 to n do
>   M[k,1]:=xx[k];
>   M[k,2]:=yy[k];
> od;
> t:=0;
> for j from 3 to n+1 do
>   for i from 1 to n-1-t do
>     M[i,j]:=(M[i+1,j-1]-M[i,j-1])/(M[i+t+1,1]-M[i,1]);
>   od;
>   t:=t+1;
> od;
> print(`A MATRIZ CONTENDO AS DIFERENÇAS DIVIDIDAS É:`,M);
> pl:=yy[1];          # construção do polinómio pela fórmula de
Newton
> f:=(x-xx[1]);
> for k from 2 to n do;
> pl:=pl+f*M[1,k+1]:
> f:=f*(x-xx[k]):
> od;
> print(`O polinómio interpolador de Newton é: p(x)=`,pl);
> print(`Simplificado:p(x)=`,simplify(pl));
> simplify(pl):
> p:=unapply(%,x);
> end;
```


PROBLEMA 1: Um atleta fez 4 ensaios para percorrer uma distância de 200 metros em menor tempo possível, aplicando velocidades diferentes em cada um dos ensaios. Os dados obtidos foram registados na seguinte tabela:

VELOCIDADE (m/s)	TEMPO GASTO (S)
20	50
24	35
30	25
35	20

Tendo em conta os dados acima, quanto tempo gastaria o atleta se ele fosse a uma velocidade de 27m/s?

RESOLUÇÃO

Este problema é facilmente resolvido através de interpolação polinomial. Por exemplo, utiliza-se o procedimento **newtonpol**, para determinar o polinómio interpolador e depois calcular **p(27)**.

> **newtonpol();**

Quantos nós serão utilizados?

> **4;**

Introduza o valor de cada um dos nós

> **20,24,30,35;**

Introduza os valores nodais

> **50,35,25,20;**

A MATRIZ CONTENDO AS DIFERENÇAS DIVIDIDAS É:

$$\begin{bmatrix} 20 & 50 & \frac{-15}{4} & \frac{5}{24} & \frac{-13}{1320} \\ 24 & 35 & \frac{-5}{3} & \frac{2}{33} & 0 \\ 30 & 25 & -1 & 0 & 0 \\ 35 & 20 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

O polinómio interpolador de Newton é: $p(x)=$

$$125 - \frac{15}{4}x + \frac{5}{24}(x-20)(x-24) - \frac{13}{1320}(x-20)(x-24)(x-30)$$

$$\text{Simplificado: } p(x) = \frac{4035}{11} - \frac{4045}{132}x + \frac{1237}{1320}x^2 - \frac{13}{1320}x^3$$

$$x \rightarrow \frac{4035}{11} - \frac{4045}{132}x + \frac{1237}{1320}x^2 - \frac{13}{1320}x^3$$

> **p(27);**

$$\frac{1581}{55}$$

> **evalf(%);**

$$28.74545455$$

Resposta: O atleta gastaria, provavelmente, um tempo aproximado de 28,8 segundos.

SPLINE

O procedimento para determina o polinómio interpolador P , através da função Spline tem a seguinte sintaxe: **spl:=proc()** .

#SPLINE

```
> restart;
> spl:=proc()
> local m,n,spl;
> global xx,yy,Spl;
> print(`Introduza o número de nós`);
> n:=readstat();
> print(`Introduza os nós`);
> xx:=readstat();
> print(`Introduza os valores nodais`);
> yy:=readstat();
> print(`Escolha o grau do Spline (o grau varia de 1 a 3)`);
> m:=readstat();
> print(`A função spline é definida por`);
> spl:=spline([xx],[yy],x,m);
> Spl:=spl;
> end;
```

EXEMPLO 1: Calcular um Spline Cúbica que interpola os pontos:

x	0	1	2	3
y	0	1	4	3

```
> spl( );
Introduza o número de nós

> 4;
Introduza os nós

> 0,1,2,3;
Introduza os valores nodais

> 0,1,4,3;
Escolha o grau do Spline (o grau varia de 1 a 3)

> 3;
```

A função spline é definida por

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{1}{5}x + \frac{4}{5}x^3 & x < 1 \\ \frac{14}{5} - \frac{41}{5}x + \frac{42}{5}x^2 - 2x^3 & x < 2 \\ -\frac{114}{5} + \frac{151}{5}x - \frac{54}{5}x^2 + \frac{6}{5}x^3 & \text{otherwise} \end{array} \right.$$

INTEGRAÇÃO NUMÉRICA

O Maple fornece um conjunto de comandos do pacote “**student**” que permite efectuar a integração de qualquer função, utilizando as regras de integração expostas e obter uma visualização gráfica para as regras do rectângulo e do ponto médio. Estes comandos são: [leftbox](#), [leftsum](#), [middlebox](#), [middlesum](#), [rightbox](#), [rightsum](#), [trapezoid](#) e [simpson](#).

Mas o objectivo deste trabalho não é isto, o objectivo é implementar rotinas no Maple que permite numericamente determinar uma aproximação para a integração numérica.

REGRA DE TRAPÉZIO

O procedimento para encontrar uma aproximação numérica utilizando a regra de Trapézio tem a seguinte sintaxe: **trapézio:=proc()** .

IMPLEMENTAÇÃO DA REGRA DE TRAPÉZIO

```
> restart;
> trapézio:=proc()
> local a,b,h,n,i,x,II_aprox,II_exact,II,f,erro;
> global trap;
> print(`Introduza o valor de a`);
> a:=readstat();
> print(`Introduza o valor de b`);
> b:=readstat();
> x[0]:=a;
> print(`quantos intervalos serão utilizados`);
> n:=readstat();
> x[n]:=b;
> print(`Introduza a função f`);
> f:=readstat();
> h:=(b-a)/n;
> for i from 1 to n-1 do
> x[i]:=x[i-1]+h
> end do;
> for i from 1 to n do
> II[i]:=evalf(h*(f(x[i-1])+f(x[i]))/2);
> od;
> II_aprox:=sum(II[j],j=1..n);
> print(`A regra de integração de trapézio é:`,II_aprox);
> II_exact:=evalf(int(f(x),x=a..b));
> erro:=abs(II_aprox-II_exact);
> print(`O valor exacto do integral é:`,II_exact);
> print(`O erro cometido é:`,erro);
> end;
```

EXEMPLO 2: Determinar uma aproximação para $f(x) = \int_0^1 e^{-x^2} dx$, usando a regra de trapézio.

> **trapézio()** ;

Introduza o valor de a

> **0;**

Introduza o valor de b

> **1;**

quantos intervalos serão utilizados

> **4;**

Introduza a função f

> **unapply(exp(-x^2), x) ;**

A regra de integração de trapézio é: , .7429840977

O valor exacto do integral é: , .7468241330

O erro cometido é: , .0038400353

REGRA DE SIMPSON

O procedimento para encontrar uma aproximação numérica utilizando a regra de Simpson tem a seguinte sintaxe: **simpson:=proc()** .

> # IMPLEMENTAÇÃO DA REGRA DE SIMPSON

```
> restart;
> simpson:=proc()
> local a,b,c,h,n,i,x,II,II_aprox,II_exact,f,erro;
> global simp;
> print(`Introduza o valor de a`);
> a:=readstat();
> print(`Introduza o valor de b`);
> b:=readstat();
> x[0]:=a:
> print(`Quantos intervalos serão utilizados`);
> n:=readstat();
> x[n]:=b:
> c:=(b+a)/2;
> print(`Introduza a função`);
> f:=readstat();
> h:=(b-a)/n;
> for i from 1 to n-1 do;
> x[i]:=x[i-1]+h
> end do;
> for i from 1 to n do
> II[i]:=evalf(h*(f(x[i-1]))+4*f((x[i-1]+x[i])/2)+f(x[i]))/6);
> od:
> II_aprox:=sum(II[j],j=1..n);
> print(`A regra de integração de simpson é:`,II_aprox);
> II_exact:=evalf(int(f(x),x=a..b));
> print(`O valor exacto do integral é:`,II_exact);
> erro:=abs(II_aprox-II_exact);
> print(`O erro cometido é:`,erro);
> end;
```

EXEMPLO 3: Determinar uma aproximação para $f(x) = \int_0^1 e^{-x^2} dx$, usando a regra de simpson.

```
> simpson();
```

Introduza o valor de a

```
> 0;
```

Introduza o valor de b

```
> 1;
```

Quantos intervalos serão utilizados

```
> 4;
```

Introduza a função

```
> unapply(exp(-x^2), x);
```

A regra de integração de simpson é: ,.7468261207

O valor exacto do integral é: ,.7468241330

O erro cometido é: ,.19877 10⁻⁵